

**Étude de la résonance de spin dans l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$
sous pression hydrostatique**

par

Serge Charlebois

mémoire présenté au Département de physique en vue
de l'obtention du grade de maître ès sciences (M. Sc.)

**Faculté des sciences
Université de Sherbrooke**

Sherbrooke, Québec, Canada, juillet 1996



National Library
of Canada

Acquisitions and
Bibliographic Services Branch

395 Wellington Street
Ottawa, Ontario
K1A 0N4

Bibliothèque nationale
du Canada

Direction des acquisitions et
des services bibliographiques

395, rue Wellington
Ottawa (Ontario)
K1A 0N4

Your file Votre référence

Our file Notre référence

The author has granted an irrevocable non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of his/her thesis by any means and in any form or format, making this thesis available to interested persons.

L'auteur a accordé une licence irrévocable et non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de sa thèse de quelque manière et sous quelque forme que ce soit pour mettre des exemplaires de cette thèse à la disposition des personnes intéressées.

The author retains ownership of the copyright in his/her thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without his/her permission.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège sa thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

ISBN 0-612-15406-8

Canada

Résumé

La résonance de spin des électrons de conduction dans l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ a été mesurée par une technique de photoconductivité dans l'infrarouge lointain tout en soumettant l'échantillon à différentes pressions hydrostatiques allant jusqu'à 9.85 kbar. Dans les mêmes conditions de pression hydrostatique, la technique de photoconductivité a également été utilisée pour mesurer la résonance cyclotron et le spectre de transitions interbandes. L'ajustement d'un modèle théorique de formalisme $\vec{k} \cdot \vec{p}$ aux mesures expérimentales a permis d'obtenir la valeur des paramètres de la bande de conduction, à savoir E_g , E_p , F et N_1 , ainsi que leur variation en pression. Ces paramètres permettent de calculer la masse effective (m_c^*) et le facteur-g effectif (g_c^*) des électrons de conduction en $\vec{k} = 0$ et à champ magnétique nul pour la gamme de pressions hydrostatiques allant jusqu'à 9.85 kbar. À partir des variations des paramètres en fonction de la pression, on peut aussi déduire le déplacement en énergie des différentes bandes et l'évolution de leur couplage.

On montre également que l'effet de la pression hydrostatique sur la structure de bande est analogue au changement de la composition de l'alliage semiconducteur. Ce constat pourrait être utilisé lors de la conception et de l'optimisation de dispositifs formés d'hétérostructures à couches contraintes.

Le modèle théorique utilisé tient compte explicitement de la bande de conduction Γ_6 et des trois bandes de valence Γ_7 et Γ_8 , les autres bandes étant incluses comme perturbations. Le modèle tient également compte de l'énergie de liaison de l'exciton dans l'analyse du spectre interbande et de l'effet magnéto-polaron résonant comme correction aux mesures de résonance cyclotron.

Les valeurs des paramètres obtenus permettent de compléter avec une bonne précision notre connaissance de la bande de conduction de l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$. Ceci devrait constituer un bon point de départ pour l'analyse plus complexe du spectre de photoconductivité interbande de ce matériau.

Remerciements

Je tiens à remercier mon directeur de recherche Jean Beerens, pour sa participation et son attention soutenue tout au long des travaux qui font l'objet de ce mémoire. Patience et rigueur intellectuelle sont au nombre des valeurs discrètement induites par le travail sous sa supervision.

Je tiens également à remercier toute l'équipe technique du département et plus particulièrement Jacques Corbin pour sa disponibilité et la diligence avec laquelle il a su répondre à mes nombreuses demandes.

Je désire aussi remercier les autres membres du jury, messieurs André-Marie Tremblay et Denis Morris, pour la lecture attentive de ce mémoire. Leurs pertinents commentaires m'auront permis d'approfondir jusqu'au dernier instant les multiples facettes de l'étude présentée dans ces pages.

Je dois finalement souligner le soutien financier du Centre de recherche en physique du solide (CRPS) sans qui ces travaux n'auraient pu être menés à terme.

Table des matières

Résumé	i
Remerciements	ii
Table des matières	iii
Liste des figures et graphiques	vi
Liste des tableaux	viii
Introduction	1
Chapitre 1 Fondements théoriques	3
1.1 Structure de bande de la famille des III-V	3
1.2 Structure de bande sous champ magnétique	7
1.3 Modèle utilisé	8
1.3 a) Son origine et son évolution	9
1.3 b) Le modèle de Weiler	10
1.3 c) Les paramètres du modèle	14
1.3 d) Certaines solutions analytiques approximatives de l'hamiltonien	15
1.4 Transitions optiques	18
1.4 a) Les transitions interbandes	19
1.4 b) La résonance cyclotron	20
1.5 La résonance de spin	22

Table des matières

1.5 a)	Les mécanismes permettant la résonance de spin	23
1.5 b)	La résonance de spin des impuretés	24
1.5 c)	L'effet Overhauser	25
1.6	Les contraintes mécaniques externes et internes	26
1.6 a)	La déformation du cristal sous différentes contraintes	27
1.6 b)	La déformation de la structure de bande par la pression hydrostatique	28
1.6 c)	Les effets de la pression sur la résonance de spin	30
Chapitre 2 Méthode expérimentale		31
2.1	Spectre d'absorption et photoconductivité	31
2.2	La détection synchrone et la technique du ratio en temps réel	32
2.3	Montage expérimental	34
2.3 a)	L'échantillon	34
2.3 b)	Le champ magnétique	35
2.3 c)	Le cryostat	35
2.3 d)	La pression hydrostatique	35
2.3 e)	Le porte-échantillon	37
2.4	Mesures du spectre de transitions interbandes	37
2.5	Mesures de la résonance cyclotron et de la résonance de spin	39
Chapitre 3 Résultats et analyse		44
3.1	Caractérisation de base de l'échantillon	44
3.2	Effet de la pression hydrostatique sur les résonances et sur la bande interdite	45
3.3	Résonance de spin des états d'impuretés	49

Liste des figures et graphiques

3.4	Comparaison entre la théorie $\vec{k} \cdot \vec{p}$ et l'expérience	51
3.5	Comportement en pression des paramètres de bande	52
3.5 a)	Comparaison avec certains résultats antérieurs	54
3.5 b)	Le comportement attendu des paramètres sous l'effet de la pression	57
3.5 c)	La déformation de la structure de bande sous l'effet de la pression	60
Conclusion		63
Annexe I Correction excitonique aux transitions interbandes		64
Annexe II Correction polaronique		67
Bibliographie		71

Liste des figures et graphiques

1	Structure de bande du GaAs.	4
2	Structure de bande de l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ au point de symétrie Γ (centre de la zone de Brillouin).	5
3	Position des niveaux de Landau à $\vec{k} = 0$.	13
4	Diagramme en éventail des niveaux de Landau (théorique).	21
5	Déplacement des niveaux d'énergie moléculaires par la pression hydrostatique.	29
6	Circuit servant aux mesures de photoconductivité.	33
7	Shéma de la cellule à pression hydrostatique.	36
8	Porte-échantillon pour les mesures sous pression.	38
9	Montage expérimental spécifique aux mesures interbandes.	40
10	Shéma du laser moléculaire.	41
11	Mesure de photoconductivité montrant à la fois la résonance cyclotron et la résonance de spin.	42
12	Variation de la résistance de l'échantillon en fonction du champ magnétique et de la température.	44
13	Signal de photoconductivité de la résonance de spin sous différentes pressions hydrostatiques.	46
14	Signal de photoconductivité de la résonance cyclotron sous différentes pressions hydrostatiques.	46
15	Énergie et position de la résonance de spin pour différentes longueurs d'onde et pressions.	47

Liste des tableaux

16	Énergie et position de la résonance cyclotron pour différentes longueurs d'onde et pressions.	47
17	Variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la pression.	49
18	Comparaison entre la résonance de spin dans l'InSb et dans l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$.	50
19	Écart à un système de bandes paraboliques	53
20	Variation de la masse effective m_c^* en fonction de la pression hydrostatique appliquée.	55
21	Variation du facteur- g effectif g_c^* en fonction de la pression hydrostatique appliquée.	55
22	Variation de E_p en fonction de la pression hydrostatique appliquée.	56
23	Variation de F en fonction de la pression hydrostatique appliquée.	56
24	Schéma représentant l'effet magnéto-polaron résonant sur les deux premiers niveaux de Landau.	67
25	Exemple de la correction de l'effet magnéto-polaron résonant.	70

Liste des tableaux

1	Paramètres de la structure de bande de certains composés de la famille des III-V.	6
2	Fonctions de base utilisées par Weiler.	12
3	Hamiltonien simplifié développé par Weiler.	12
4	Rôle des paramètres dans l'hamiltonien $\vec{k} \cdot \vec{p}$.	14
5	Règles de sélection pour la résonance de spin.	24
6	Coefficients d'absorption de la résonance de spin.	24
7	Raies d'émission du laser moléculaire.	41
8	Comparaison de la largeur des résonances entre l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ et l' InSb .	48
9	Variation des paramètres en fonction de la pression hydrostatique appliqué.	54
10	Paramètres des bandes de valence.	54
11	Valeurs déjà publiés des paramètres de la structure de bande.	57
12	Variation des paramètres entre fonction de la composition en Ga.	59
13	Variation des paramètres entre fonction de la pression.	59
14	Estimation de F et de N_1 à partir des paramètres des bandes supérieures.	61
15	Importance de la correction polaronique.	69

Introduction

Semiconducteur appartenant à la famille des III-V, le composé $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, en accord de maille avec un substrat d'InP, possède une bande interdite d'environ 0.75 eV à température ambiante. Il peut ainsi servir d'émetteur ou de détecteur optique dans la gamme correspondant au minimum d'absorption des fibres optiques pour les télécommunications, soit à des longueurs d'onde d'environ 1550 nm . Possédant de plus une bonne mobilité électronique, ces caractéristiques en font un matériau fort intéressant sur le plan technologique. De nombreux auteurs ont étudié ce composé ternaire afin d'en décrire la structure de bande (voir [1,2] et les références qui y sont mentionnées). Au terme de travaux portant sur la magnétoabsorption interbande, Alavi *et al.* [3] ont souligné l'importance de la mesure du facteur- g électronique effectif dans le but d'affiner les valeurs des paramètres de la bande de conduction, notamment celle de l'élément de matrice interbande de Kane (E_p), fort important pour la caractérisation des processus optiques interbandes. C'est avec cet objectif que nous avons entrepris de mesurer la résonance de spin dont on peut tirer directement la valeur du facteur- g électronique effectif (g^*) et en déduire finalement E_p .

Le coefficient d'absorption relié à la résonance de spin est très faible (inférieur à 5 cm^{-1}). Ce fait rend la résonance de spin indétectable par des mesures d'absorption directe dans des échantillons de faible épaisseur, comme dans notre cas. Ajoutons également que le désordre d'alliage inhérent aux composés ternaires limite la mobilité électronique et rend cette mesure encore plus difficile. D'ailleurs, à notre connaissance, aucune mesure du facteur- g dans l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ massif par la résonance de spin n'avait été rapportée jusqu'à très récemment. Les publications antérieures reposent sur des mesures d'absorption interbande dans le composé massif ou sur des mesures de résonance sur des gaz électroniques bidimensionnels dans des hétérostructures [4]. L'observation de la résonance de spin dans ce matériau par une mesure de photoconductivité a constitué une grande partie du défi technique et surtout de l'originalité des résultats présentés ici.

Le second objectif de nos travaux a consisté à étudier l'effet sur la structure de bande de l'application d'une pression hydrostatique sur l'échantillon. L'étude sous pression du semiconducteur nous permet de mieux comprendre le comportement de la structure de bande en fonction d'une diminution du

paramètre de maille. En plus de leur intérêt fondamental, les effets de la pression trouvent un intérêt technologique avec la venue des nouveaux dispositifs formés d'hétérostructures à couches contraintes. Mentionnons que l'étude sous pression hydrostatique vient compléter les travaux de Sylvie Lasserre [5] et de Denis Pelenc [6] qui ont respectivement analysé les transitions interbandes et la résonance cyclotron sur les mêmes échantillon d' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$. Ces travaux avaient permis de déduire la dépendance en pression de l'énergie de la bande interdite et de la masse effective des électrons de conduction.

Pour faire l'analyse des résultats expérimentaux, nous avons recours à un modèle développé par Weiler *et al.* [7] reposant sur le formalisme de la théorie $\vec{k} \cdot \vec{p}$ qui traite explicitement la bande de conduction et les trois bandes de valence. Il s'agit d'un modèle plus complet que le modèle analytique utilisé par Lasserre et Pelenc [5, 6] qui tient compte des perturbations dues aux bandes de conduction supérieures. Soulignons aussi qu'afin d'obtenir un accord satisfaisant entre le modèle théorique et les mesures expérimentales, nous avons dû effectuer, dans les mêmes conditions de pression hydrostatique, des mesures de résonance cyclotron et de transitions interbandes en plus des mesures de résonance de spin. Cet ensemble de mesures prises dans les mêmes conditions constitue un autre point original des présents travaux en ce qu'il nous donne accès, en principe, à l'ensemble des paramètres de la structure de bande près du centre de la zone de Brillouin de notre échantillon.

Le premier chapitre du mémoire est consacré à l'exposé des notions théoriques nécessaires à la compréhension et à l'analyse de la résonance de spin par excitation dipolaire électrique (RSDE). Nous y abordons d'abord la structure de bande du semiconducteur étudié puis le modèle théorique utilisé pour la décrire. Vient ensuite la description des principales transitions optiques utiles à la présente étude autres que la résonance de spin qui est, elle, traitée de façon plus complète dans la section suivante.

Le deuxième chapitre traite des techniques expérimentales utilisées pour les différentes mesures. On y décrit, entre autres, les principes de la photoconductivité, de la mise sous pression, du circuit électrique et de la détection synchrone. Finalement, le chapitre 3 fait l'analyse des mesures obtenues et discute des principaux résultats.

Chapitre 1

Fondements théoriques

Ce premier chapitre expose les notions essentielles à la compréhension des travaux et analyses effectuées dans le cadre de ce mémoire. On y introduit d'abord les principales caractéristiques de la structure de bande des semiconducteurs de la famille des III-V. On décrit ensuite le modèle théorique utilisé pour l'analyse des mesures expérimentales et l'obtention des paramètres de la structure de bande. Puis, les transitions optiques pertinentes à la présente études sont étudiées, avec une attention particulière pour la résonance de spin et les mécanismes qui la rendent possible. Les effets de la pression hydrostatique sur la structure de bande et sur la résonance de spin sont finalement analysés.

1.1 Structure de bande de la famille des III-V

Les semiconducteurs de la famille des III-V ont pour liens chimiques des orbitales hybrides sp^3 formées par la mise en commun d'orbitales atomiques s et p . Plusieurs de ces composés possèdent la structure cristalline de la zinc-blende, semblable à celle du diamant (double réseau cubique à faces centrées), mais dont les deux réseaux sont occupés par des espèces atomiques différentes. Il est essentiel de noter que, par opposition aux semiconducteurs simples, comme le Ge et le Si, le groupe de symétrie de la famille des III-V ne possède pas la symétrie d'inversion des axes. Cette distinction reviendra souvent lors de la construction du modèle théorique.

Dans les composés du groupe de la zinc-blende, les bandes de valence ont leur maximum au centre de la zone de Brillouin (point de symétrie Γ). On trouve parmi eux plusieurs composés dont le minimum absolu de la bande de conduction se situe au point Γ (voir figure 1). Il en résulte une bande interdite dite "directe". De ce fait, les principales propriétés optiques et de transport des composés à bande interdite directe relèvent essentiellement de la structure de bande dans cette région de la zone de Brillouin. D'autre part, au point Γ , la bande de conduction est formée à partir des orbitales

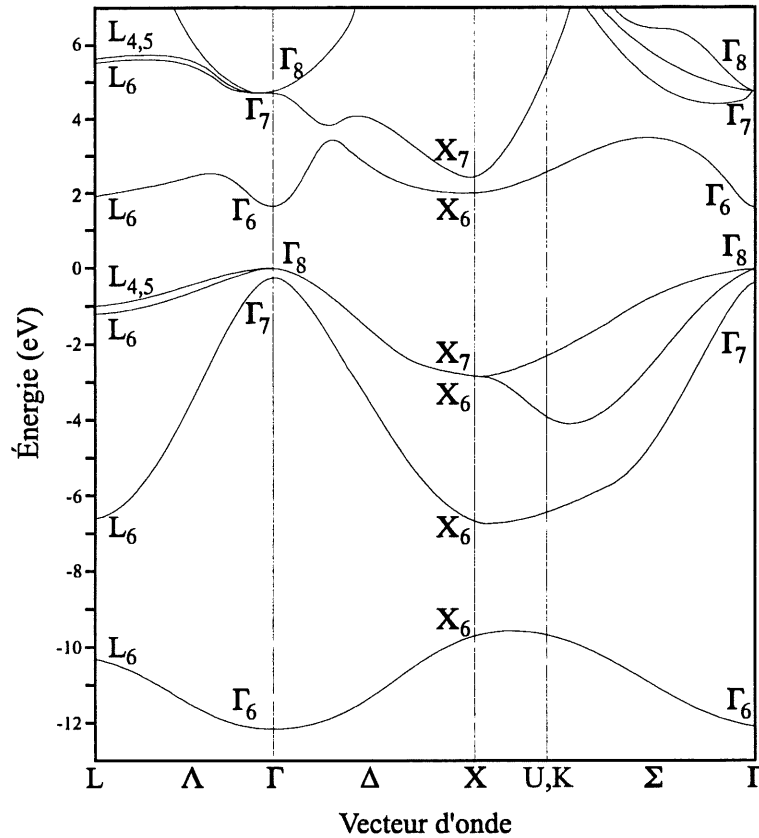


Figure 1 : Structure de bande typique d'un semiconducteur à bande interdite directe de la famille III-V. La figure illustre le cas du GaAs [45] .

s anti-liantes (doublement dégénérées par le spin) alors que les bandes de valence proviennent des orbitales p liantes (trois bandes doublement dégénérées par le spin).

La figure 2 donne une vue agrandie de la structure de bande autour du point de haute symétrie Γ . L'énergie séparant la bande de conduction de la plus proche bande de valence est désignée par E_g . Une autre énergie caractéristique du système est l'écart d'énergie qui sépare les plus hautes bandes de valence à la suivante. Cet écart d'énergie Δ trouve son origine dans le couplage entre le dipôle magnétique intrinsèque des électrons (spin) et leur dipôle orbital. On utilise le vocable "bande spin-orbite" pour désigner la bande de valence inférieure.

L'ensemble des fonctions de Bloch au point Γ forme une base de l'espace des fonctions d'onde

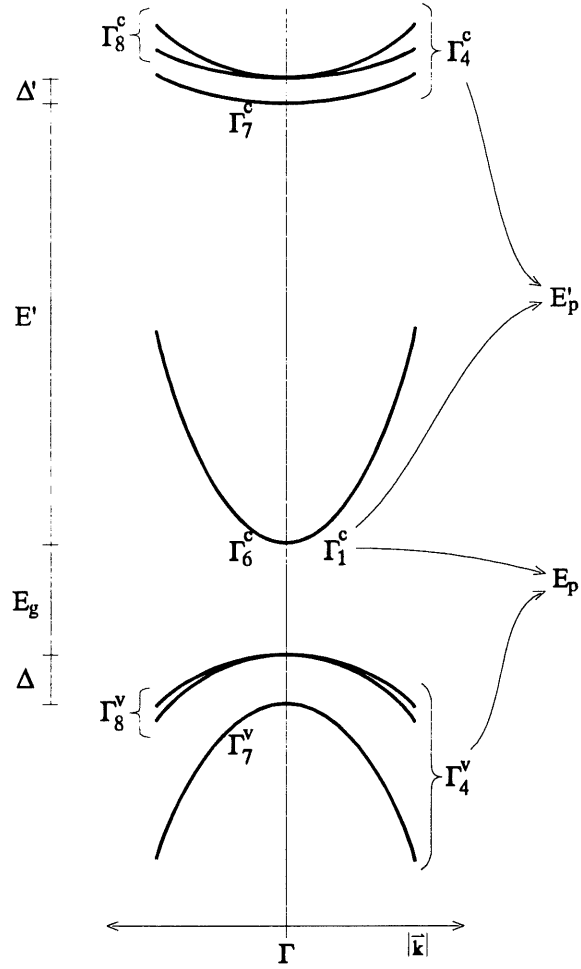


Figure 2 : Structure de bande de l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ au point de symétrie Γ (centre de la zone de Brillouin). À gauche, les bandes sont désignées dans la notation du groupe double T_d alors qu'à droite, on a utilisé la notation du groupe simple O_h . On a également indiqué les bandes qui entrent dans la définition de E_p et de E'_p .

du cristal. La façon dont ces fonctions sont modifiées sous l'action des opérations de symétries du groupe ponctuel du cristal peut être analysé en utilisant la théorie des groupes.

Au point Γ , les bandes sont identifiées, en utilisant la notation de Koster *et al.* [8], par la représentation du groupe double de symétrie T_d auxquelles leurs fonctions de Bloch sont isomorphes. Ainsi, les deux fonctions de Bloch de la bande de conduction se transforment comme les fonctions de base de la représentation Γ_6 . De même, les quatre fonctions de Bloch des premières bandes de valence

	InSb	InAs	In _{0.53} Ga _{0.47} As	GaSb	InP	GaAs
a_o (Å)	6.48	6.06	5.89	6.19	5.87	5.65
E_g (eV)	0.237	0.42	0.8117	0.814	1.423	1.519
m_c^* (m_e)	0.0139	0.0230	0.0410	0.0410	0.0803	0.0667
g_c^*	-51.3	-14.8	-4.089	-9.25	1.26	-0.44
E_p (eV)	24.4	22.2	24.13	27.9	20.7	28.9
F	-2.67	-1.02	-1.64	-2.70	-1.31	-1.97
E_p' (eV)	10.5	0.2	3.27	9	2.1	6
Δ (eV)	0.81	0.38	0.36	0.75	0.11	0.34
E' (eV)	3.25	4.18	3.46	2.75	3.37	3.14
Δ' (eV)	0.33	0.16	0.165	0.29	0.07	0.17

Tableau 1 : Paramètres de la structure de bande de certains composés de la famille des III-V (à basse température). Tiré de [9] . Ces paramètres seront définis plus loin dans le présent chapitre. On les retrouve également dans la figure 2. Les valeurs de F et E_p' ont été calculées pour $K = -2$ (voir équation 1.19, $C = -2$ dans la notation de [9]). Les valeurs E_g , m_c^* , g_c^* , E_p' et F pour In_{0.53}Ga_{0.47}As correspondent à nos résultats à pression nulle.

se transforment comme les fonctions de base de la représentation Γ_8 et les deux fonctions de Bloch de la bande de valence spin-orbite se transforment comme les fonctions de base de la représentation Γ_7 . Quant aux bandes de conduction supérieures, elles sont associées aux représentations Γ_7 et Γ_8 . Cette notation utilisant la théorie des groupes permet de simplifier l'analyse des transitions optiques et du couplage entre les différentes bandes. On utilise parfois les représentations du groupe simple O_h pour désigner les bandes, ce qui revient à négliger les effets de spin et de couplage spin-orbite. Dans ce cas, la bande de conduction est associée à la représentation Γ_1 alors que les trois bandes de valence sont associées à la représentation Γ_4 .

On distinguera les semiconducteurs à bande interdite étroite, comme InSb, ou plus large, comme GaAs. De façon générale, on constate que la masse effective des électrons de conduction (m_c^*) est plus faible dans les premiers que dans les seconds. Le facteur- g effectif des électrons de conduction (g_c^*) est par contre plus grand, en valeur absolue, pour les premiers que pour les seconds. Nous verrons dans la prochaine section que ces caractéristiques proviennent du couplage entre les bandes de valence et de conduction. Le tableau 1 expose ces tendances.

1.2 Structure de bande sous champ magnétique

Les modifications de la structure de bande introduites par l'application d'un champ magnétique externe ont été étudiées par nombre d'auteurs. L'une des premières applications à une structure de bande complexe de la théorie développée par Landau fut présentée par Roth, Lax et Zwerdling. [10] À partir de bandes paraboliques dont l'énergie est de la forme

$$E_{i,s} = E_i^o \pm \frac{\hbar^2 k^2}{2m_i^*}, \quad (1.1)$$

où i est l'indice indiquant la bande et m_i^* est la masse effective des électrons (cas +) ou des trous (cas -), ils montrent qu'en présence d'un champ magnétique $\vec{B} \parallel \vec{z}$, on obtient des bandes d'énergie de la forme suivante :

$$E'_{i,s}(\vec{B}) = E_i^o \pm \left[(n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c^i + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_i^*} \right] + s g_i^* \mu_B B, \quad (1.2)$$

$$\omega_c^i = \frac{eB}{m_i^*}, \quad (1.3)$$

où $n = 0, 1, 2, \dots$ est l'indice désignant les niveaux de Landau créés par le champ, ω_c^i est la fréquence cyclotron de la bande i , $s = \pm \frac{1}{2}$ est le nombre quantique de spin du porteur et g_i^* est le facteur gyromagnétique effectif de cette bande.

On constate que le champ magnétique quantifie le mouvement des électrons dans un plan qui lui est perpendiculaire alors que dans la direction qui lui est parallèle (\vec{z} en l'occurrence), la forme de la bande demeure inchangée. Ainsi, pour chaque bande initiale, on voit apparaître une infinité de bandes (indice n) toutes de parabolicité identique formant une échelle d'énergie définie par $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c^i$. D'autre part, alors que les états de spin sont dégénérés en absence de champ magnétique, en sa présence, chacun des niveaux de Landau se sépare en deux sous-bandes correspondant aux deux polarisations de spin électronique possibles.

Si les bandes ne sont pas paraboliques, les solutions précédentes s'appliquent toujours à condition d'inclure dans les masses effectives une dépendance en énergie. Dans ce cas, comme ω_c^i dépend de

la masse effective, l'écart d'énergie entre les niveaux de Landau ne sera plus constant en fonction de k_z et de n . Il en va de même pour la courbure des niveaux de Landau. On s'attend également à ce que le facteur gyromagnétique effectif g_i^* des bandes varie en fonction de k_z et de n .

L'efficacité des transitions optiques entre les bandes dépend, en plus des règles de sélection qui s'appliquent, des facteurs d'occupation et des densités d'états électroniques de chacune d'elles. À champ nul, la densité d'états d'une bande parabolique à trois dimensions varie comme la racine carrée de l'énergie :

$$\rho_i(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_i^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E - E_i^o}. \quad (1.4)$$

Lorsqu'on applique un champ magnétique, la densité d'états prend une toute autre forme (on peut se référer à [11]) :

$$\rho_i(E, B) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_i^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{eB}{2\hbar} \times \sum_{n=0} \sum_{s=-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{E - E_i^o \pm (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c^i + s g_i^* \mu_B B}}. \quad (1.5)$$

Alors que la densité d'états sans champ est continue et croissante en énergie, la densité d'états en champ magnétique présente une divergence au minimum de chaque sous-bande (n, s) comme le ferait un gaz électronique unidimensionnel. On en déduit naturellement qu'en présence d'un champ magnétique, les transitions optiques prédominantes se produiront à partir du bord de chaque sous-bande. En pratique, les divergences de la densité d'états seront amoindries par l'élargissement des sous-bandes dû à la température ou aux défauts cristallins. Les pics du spectre d'absorption seront alors élargis.

1.3 Modèle utilisé

À la suite de ce survol qualitatif de la structure de bande des semiconducteurs de la famille des III-V, abordons maintenant la construction du modèle théorique. Procédons d'abord par l'étude de la théorie de Kane puis de son évolution menant au modèle utilisé. Le lecteur est notamment référé

aux travaux de Fishman [12], analysant avec simplicité la théorie de Kane, et à ceux de Weiler, [13] discutant du détail du modèle utilisé.

1.3 a) Son origine et son évolution

Kane fut parmi les premiers à utiliser la théorie $\vec{k} \cdot \vec{p}$ pour trouver les énergies et fonctions propres des états situés près des extrema de bande ($|k|$ petit). Au lieu d'utiliser l'approche perturbative classique qui consiste à développer l'hamiltonien en puissances croissantes de \vec{k} , il choisit de diagonaliser exactement l'hamiltonien $\vec{k} \cdot \vec{p}$ pour un nombre restreint de bandes et de traiter les couplages avec les autres bandes en perturbation jusqu'au deuxième ordre. Ces termes de perturbation s'expriment comme des sommes d'éléments de matrice de l'opérateur \vec{p} et deviennent des paramètres ajustables du modèle. Ce modèle a été publié par Kane [14] pour l'étude d'un système formé de la bande de conduction (de type s) et des trois bandes de valence (de type p). Les parties périodiques des fonctions d'onde des électrons dans ces bandes sont représentées respectivement par S , X , Y et Z en raison de leur similitude avec les orbitales atomiques dont elles sont issues. Afin de simplifier la diagonalisation de l'hamiltonien, celui-ci est projeté sur une base de fonctions qui diagonalisent le terme spin-orbite de l'hamiltonien. Cette base est formée de combinaisons linéaires de S , X , Y et Z en produit direct avec les polarisations de spin $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$.

Dans la même période, Luttinger [15] utilisa la théorie des groupes pour trouver les éléments de matrice reliant les bandes de valence qui se transforment comme Γ_8 jusqu'au second ordre en \vec{k} . Il en déduisit des paramètres qui ne sont autres que des combinaisons linéaires des paramètres de Kane et il obtint également un paramètre additionnel q (nul pour une structure cristalline possédant la symétrie d'inversion) associé à l'anisotropie des surfaces d'énergie constante.

Au modèle de Luttinger, Roth *et al.* [10] ont ajouté la bande de valence spin-orbite (Γ_7^u). Ils ont obtenu l'expression des paramètres de Luttinger tenant compte des contributions de la bande spin-orbite. À ce dernier modèle, Pidgeon and Brown [16] ont ajouté la bande de conduction complétant ainsi la structure de bande au point Γ . Ce dernier modèle fut baptisé "quasi-germanium" car il néglige l'effet de l'absence de symétrie d'inversion sur les niveaux d'énergie.

1.3 b) Le modèle de Weiler

Le modèle utilisé pour la présente étude fut développé par Weiler [7, 13], à partir notamment des travaux de Pidgeon et Brown. À la différence de ses prédécesseurs, Weiler utilise le groupe double de symétrie T_d plutôt que le groupe simple comme point de départ de ses travaux. Avec une base de huit fonctions et certaines approximations¹, elle obtient un hamiltonien de même forme que Pidgeon et Brown, c'est-à-dire diagonal par bloc de quatre fonctions. Cette simplification permet de regrouper les fonctions de base en deux séries indépendantes (tableau 2). Ainsi, on réduit le problème initial de la diagonalisation d'un hamiltonien 8×8 à celui, beaucoup plus simple, de la diagonalisation de deux matrices 4×4 qui nous donnent deux séries de fonctions propres solutions du problème, notées série a ou b . La structure de l'hamiltonien met clairement en évidence que, dans les limites des approximations utilisées, les bandes ne sont en interaction que par groupe de quatre, les séries a et b étant sans couplage mutuel. Le tableau 3 donne la forme précise des deux parties de l'hamiltonien développé par Weiler. Notons que sous cette forme, l'hamiltonien de Weiler est réel.

Weiler a simplifié l'analyse du couplage entre les bandes en modifiant la règle d'identification des niveaux de Landau dans l'hamiltonien. L'indice des niveaux de Landau de la bande de conduction prend les valeurs habituelles $n = 0, 1, 2, \dots$ alors que n prend les valeurs $1, 2, 3, \dots$ pour la bande de trous lourds et $-1, 0, 1, \dots$ pour la bande de trous légers. Dans le cas de la bande spin-orbite, l'indice des niveaux de Landau débute à -1 pour la série a et à 1 pour la série b . Dans cette notation, seuls les niveaux ayant un même indice de Landau sont couplés entre eux. Ainsi, par exemple, le premier niveau de Landau $n = -1$ de la bande de trous légers n'est aucunement couplé à la bande de conduction. Cela permet, entre autre, de mettre en évidence l'origine de la forte masse effective des trous légers dans ce niveau de Landau qui est comparable à la masse effective des trous lourds. Dans la notation de Weiler, la règle de sélection des transitions interbandes s'écrit simplement $\Delta n = \pm 1$.

Cette notation des niveaux de Landau, conjuguée au fait que l'hamiltonien du tableau 3 est réel, nous amène à distinguer trois formes particulières que prend l'hamiltonien pour différentes valeurs de l'indice n des niveaux de Landau :

¹ Les principales approximations sont décrites sommairement à la section suivante.

- pour $n = -1$:
 - Le bloc H_a se réduit à une matrice 2×2 ne donnant de solutions que pour la bande de trous légers et la bande spin-orbite.
 - Le bloc H_b est scalaire et ne donne de solution que pour la bande de trous légers;
- pour $n = 0$:
 - Le bloc H_a se réduit à une matrice 3×3 ne donnant de solutions que pour la bande de conduction, la bande de trous légers et la bande spin-orbite.
 - Le bloc H_b se réduit à une matrice 2×2 ne donnant de solutions que pour la bande de conduction et la bande de trous légers;
- pour $n \geq 1$:
 - L'hamiltonien prend sa forme complète et mène à huit solutions distinctes.

La figure 3 montre la position des niveaux de Landau à $\vec{k} = 0$ telle qu'obtenue par la diagonalisation de l'hamiltonien. La non-parabolicité des bandes se manifeste par l'écart non constant entre les niveaux d'une même bande.

$$a : \begin{cases} |1\rangle = \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^6 = S \uparrow \\ |3\rangle = \Psi_{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}}^8 = -\frac{i}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow \\ |5\rangle = \Psi_{\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}}^8 = \frac{i}{\sqrt{6}} [(X - iY) \uparrow + 2Z \downarrow] \\ |7\rangle = \Psi_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^7 = -\frac{i}{\sqrt{3}} [(X - iY) \uparrow - Z \downarrow] \end{cases} \quad b : \begin{cases} |2\rangle = \Psi_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^6 = S \downarrow \\ |4\rangle = \Psi_{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}}^8 = -\frac{i}{\sqrt{6}} [(X + iY) \downarrow - 2Z \uparrow] \\ |6\rangle = \Psi_{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}}^8 = -\frac{i}{\sqrt{2}} (X - iY) \downarrow \\ |8\rangle = \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^7 = -\frac{i}{\sqrt{3}} [(X + iY) \uparrow + Z \downarrow] \end{cases}$$

Tableau 2 : Fonctions de base utilisées par Weiler.

$$H_a = \begin{bmatrix} E_g + s \begin{bmatrix} (2n+1)F \\ +N_1 + n + 1 \end{bmatrix} & \sqrt{\frac{1}{2}nsE_p} & -\sqrt{\frac{1}{6}(n+1)sE_p} & \sqrt{\frac{1}{3}(n+1)sE_p} \\ \sqrt{\frac{1}{2}nsE_p} & -s \begin{bmatrix} (n - \frac{1}{2})(\gamma_1 + \gamma') \\ +\frac{3}{2}\kappa \end{bmatrix} & s\gamma''\sqrt{3n(n+1)} & -s\gamma''\sqrt{6n(n+1)} \\ -\sqrt{\frac{1}{6}(n+1)sE_p} & s\gamma''\sqrt{3n(n+1)} & -s \begin{bmatrix} (n + \frac{3}{2})(\gamma_1 - \gamma') \\ -\frac{1}{2}\kappa \end{bmatrix} & \frac{1}{\sqrt{2}}s[(2n+3)\gamma' - \kappa - 1] \\ \sqrt{\frac{1}{3}(n+1)sE_p} & -s\gamma''\sqrt{6n(n+1)} & \frac{1}{\sqrt{2}}s[(2n+3)\gamma' - \kappa - 1] & -\Delta - s \begin{bmatrix} (n + \frac{3}{2})\gamma_1 \\ -\kappa - \frac{1}{2} \end{bmatrix} \end{bmatrix} \begin{matrix} |1\rangle \\ |3\rangle \\ |5\rangle \\ |7\rangle \end{matrix}$$

$$H_b = \begin{bmatrix} E_g + s \begin{bmatrix} (2n+1)F \\ -N_1 + n \end{bmatrix} & \sqrt{\frac{1}{6}nsE_p} & -\sqrt{\frac{1}{2}(n+1)sE_p} & \sqrt{\frac{1}{3}nsE_p} \\ \sqrt{\frac{1}{6}nsE_p} & -s \begin{bmatrix} (n - \frac{1}{2})(\gamma_1 - \gamma') \\ +\frac{1}{2}\kappa \end{bmatrix} & s\gamma''\sqrt{3n(n+1)} & -\frac{1}{\sqrt{2}}s[(2n-1)\gamma' + \kappa + 1] \\ -\sqrt{\frac{1}{2}(n+1)sE_p} & s\gamma''\sqrt{3n(n+1)} & -s \begin{bmatrix} (n + \frac{3}{2})(\gamma_1 + \gamma') \\ -\frac{3}{2}\kappa \end{bmatrix} & s\gamma''\sqrt{6n(n+1)} \\ \sqrt{\frac{1}{3}nsE_p} & -\frac{1}{\sqrt{2}}s[(2n-1)\gamma' + \kappa + 1] & s\gamma''\sqrt{6n(n+1)} & -\Delta - s \begin{bmatrix} (n - \frac{1}{2})\gamma_1 \\ +\kappa + \frac{1}{2} \end{bmatrix} \end{bmatrix} \begin{matrix} |2\rangle \\ |4\rangle \\ |6\rangle \\ |8\rangle \end{matrix}$$

 Tableau 3 : Hamitonien simplifié développé par Weiler. E_p est défini à l'équation 1.12 et $s = \frac{\hbar e B}{m}$ est l'énergie cyclotron de l'électron libre.

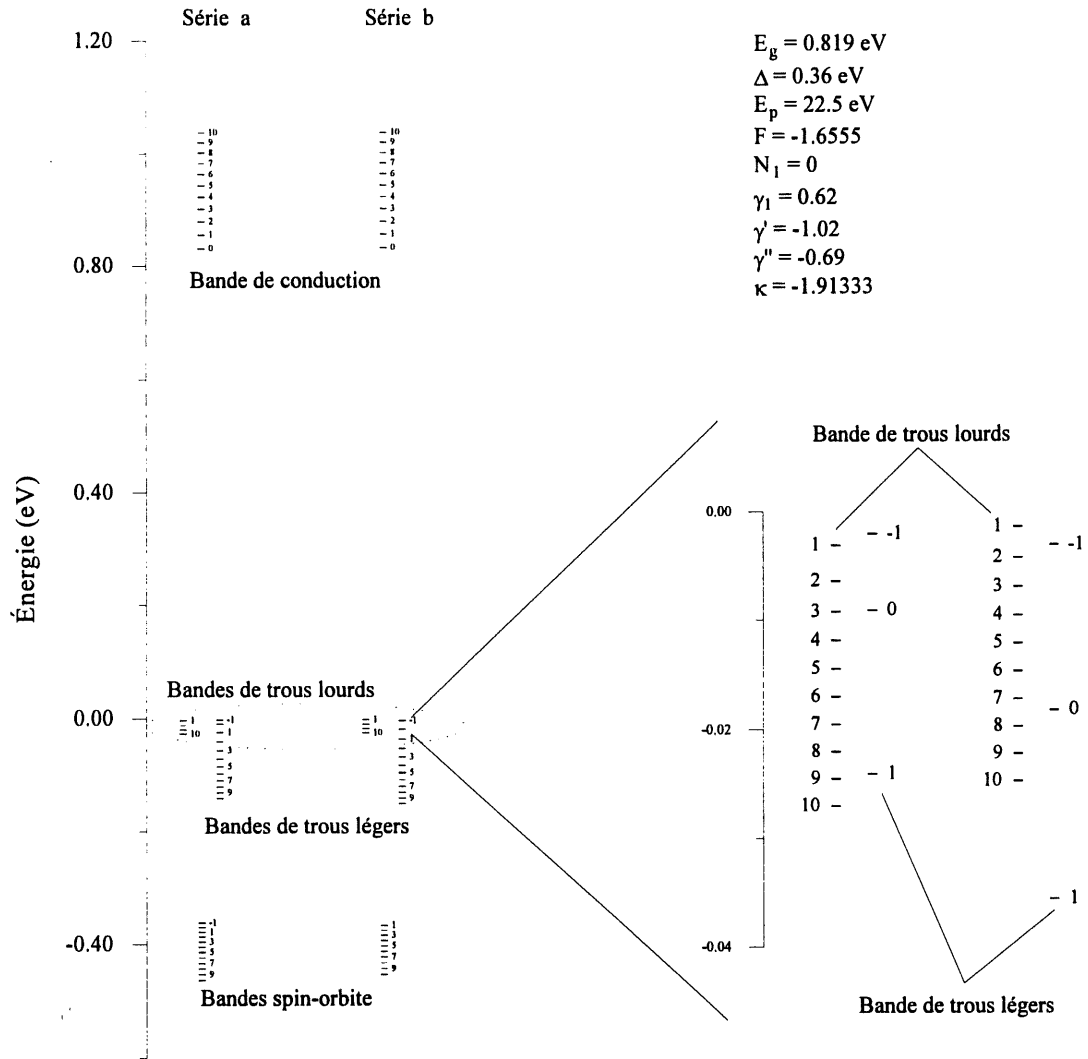


Figure 3 : Position des niveaux de Landau à $\vec{k} = 0$ et à 10 T telle qu'obtenue par la diagonalisation de l'hamiltonien avec les paramètres (indiqués dans la figure) correspondant à une pression nulle. Chaque niveau de Landau est repéré par son indice n pour chacune des bandes et des séries (a ou b). Les valeurs des paramètres utilisées pour le calcul sont indiquées dans la figure.

$f(\vec{k})$ Élément de l'hamiltonien	k_x k_y k_z (Γ_5)	\vec{k}^2 (Γ_1)	$2k_z^2 - k_x^2 - k_y^2$ $\sqrt{3}(k_x^2 - k_y^2)$ (Γ_3)	$\{k_y, k_z\}$ $\{k_z, k_x\}$ $\{k_x, k_y\}$ (Γ_4)	$i[k_y, k_z]$ $i[k_z, k_x]$ $i[k_x, k_y]$ (Γ_4)
$\langle \Gamma_6^c f(\vec{k}) \Gamma_6^c \rangle$		F			N_1
$\langle \Gamma_6^c f(\vec{k}) \Gamma_8^v \rangle$	P		N_2	G	N_3
$\langle \Gamma_6^c f(\vec{k}) \Gamma_7^v \rangle$	P'			G'	
$\langle \Gamma_8^v f(\vec{k}) \Gamma_8^v \rangle$	C	γ_1	γ_2	γ_3	κ, q
$\langle \Gamma_7^v f(\vec{k}) \Gamma_7^v \rangle$		γ'_1			κ'
$\langle \Gamma_7^v f(\vec{k}) \Gamma_8^v \rangle$	C'		γ'_2	γ'_3	κ''

Tableau 4 : Rôle des paramètres dans l'hamiltonien $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Les colonnes donnent la forme du terme de l'hamiltonien ainsi que sa représentation. Tiré de [13]

1.3 c) Les paramètres du modèle

L'utilisation par Weiler du groupe double de symétrie T_d comme point de départ mène à l'apparition de nouveaux paramètres. Ces paramètres reliant les bandes Γ_8^v et Γ_7^v , Γ_8^v et Γ_8^v ou Γ_7^v et Γ_7^v sont tous indépendants lorsqu'on utilise uniquement le groupe double pour traiter le problème. Le tableau 4 dresse la liste des paramètres du modèle de Weiler. On en déduit, par exemple, que le paramètre F intervient dans un terme de couplage en k^2 entre les bandes de conduction, alors que P intervient dans un terme en \vec{k} entre les bandes de conduction et de valence.

Ce tableau permet de voir les similitudes qui existent entre les paramètres obtenus à partir du groupe simple par Roth *et al.* ($C, P, G, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \kappa, q$) et les nouveaux paramètres obtenus par Weiler ($C', P', G', \gamma'_1, \gamma'_2, \gamma'_3, \kappa', \kappa''$). L'une des approximations utilisées pour le calcul de l'hamiltonien du tableau 3 met à profit ces similitudes. Elle consiste à réduire le nombre de paramètres indépendants en identifiant les paramètres provenant d'éléments de matrice de même symétrie qui relient la bande de conduction aux bandes de valence ou les bandes de valence entre elles. Cette approximation, dite "du groupe simple" pour des raisons évidentes, conduit à identifier les paramètres de la façon suivante :

$$\langle \Gamma_4^v | f(\vec{k}) | \Gamma_4^v \rangle : \quad \gamma'_1 = \gamma_1, \quad \gamma'_2 = \gamma_2, \quad \gamma'_3 = \gamma_3, \quad \kappa' = \kappa, \quad C' = C; \quad (1.6)$$

$$\langle \Gamma_1^c | f(\vec{k}) | \Gamma_4^v \rangle : \quad P' = P, \quad G' = G. \quad (1.7)$$

Pour réduire l'hamiltonien en deux blocs 4×4 , on doit négliger les termes proportionnels à q , C , G , N_2 et N_3 ainsi que la plupart des termes d'anisotropie² des bandes de valence, caractérisés entre autres par un paramètre μ défini comme :

$$\mu \equiv \frac{1}{2} (\gamma_3 - \gamma_2) . \quad (1.8)$$

À partir des paramètres γ_1 , γ_2 et γ_3 , Luttinger définit deux nouveaux paramètres qui comprennent explicitement l'anisotropie des bandes de valence [15] :

$$\gamma' \equiv \gamma_3 - 2\mu \cdot f(\theta, \phi) , \quad (1.9)$$

$$\gamma'' \equiv \frac{1}{3}\gamma_2 + \frac{2}{3}\gamma_3 - \frac{1}{3}\mu \cdot f(\theta, \phi) , \quad (1.10)$$

$$f(\theta, \phi) \equiv \left(\frac{3 \cos^2 \theta - 1}{2} \right)^2 + \frac{3}{4} \cos^2 2\phi \sin^4 \theta , \quad (1.11)$$

où θ et ϕ sont les angles qui situent l'orientation du champ \vec{B} par rapport aux axes du cristal.

Il importe finalement de définir l'élément de matrice de Kane à partir des fonctions d'onde de la bande de conduction Γ_1^c et de la bande de valence Γ_4^v :

$$E_p \equiv \frac{2m_e P^2}{\hbar^2} = \frac{2}{m_e} |\langle \Gamma_1^c | p_x | \Gamma_4^v \rangle|^2 . \quad (1.12)$$

On constate que E_p représente le couplage par le terme $\vec{k} \cdot \vec{p}$ de l'hamiltonien entre les bandes de conduction et de valence et n'est autre que l'expression en unités d'énergie du paramètre P de l'hamiltonien.

1.3 d) Certaines solutions analytiques approximatives de l'hamiltonien

Pour mieux comprendre le rôle de chaque paramètre, nous procédons maintenant à l'étude de so-

² Plus précisément, il s'agit des termes proportionnels au paramètre de déformation des surfaces d'énergie constante des bandes de valence, désignés par "warping terms" dans la littérature anglaise.

lutions analytiques approximatives de l'hamiltonien pour $\vec{k} = 0$ fournies par Aggarwal [17]. Au premier ordre, en champ magnétique B (valide lorsque $E_g \gg \hbar\omega_c^*$, voir [13] pour les équations plus générales), les énergies des deux sous-bandes des niveaux de Landau de la bande de conduction sont données par :

$$E_a^c[n] \simeq E_g + (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c^* + \frac{1}{2}g^*\mu_B B, \quad (1.13)$$

$$E_b^c[n] \simeq E_g + (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c^* - \frac{1}{2}g^*\mu_B B. \quad (1.14)$$

où $\omega_c^* = \frac{eB}{m^*}$ est défini à partir de la masse effective et g^* est le facteur- g effectif (facteur gyromagnétique) des électrons dans la bande. Comme les bandes ne sont pas paraboliques, on s'attend à ce que la masse effective ainsi que le facteur- g varient en fonction du champ magnétique. Nous nous intéresserons davantage à la valeur de m^* et de g^* à $\vec{k} = 0$ et à champ nul que l'on désignera par m_c^* et g_c^* :

$$\left(\frac{m_c^*}{m_e}\right)^{-1} = \lim_{B \rightarrow 0} \left(\frac{m^*}{m_e}\right)^{-1} = 1 + \sum_u \frac{|\langle \Gamma_6^c | p_x | u \rangle|^2}{E_c - E_u}, \quad (1.15)$$

$$\frac{g_c^*}{g_e} = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{g^*}{g_e} = 1 + \frac{1}{im_e} \sum_u \frac{\langle \Gamma_6^c | p_x | u \rangle \langle u | p_y | \Gamma_6^c \rangle - \langle \Gamma_6^c | p_y | u \rangle \langle u | p_x | \Gamma_6^c \rangle}{E_c - E_u}. \quad (1.16)$$

où les sommes sont prises sur les bandes u d'énergie E_u . E_c est l'énergie de la bande de conduction et m_e et g_e sont respectivement la masse et le facteur- g de l'électron libre.

La définition de E_p (éq. 1.12) nous permet de reformuler les équations précédentes en fonction des paramètres du modèle :

$$\left(\frac{m_c^*}{m_e}\right)^{-1} \simeq 1 + \frac{1}{3}E_p \left[\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta} \right] + 2F, \quad (1.17)$$

$$\frac{g_c^*}{g_e} \simeq 1 - \frac{1}{3}E_p \left[\frac{1}{E_g} - \frac{1}{E_g + \Delta} \right] + 2N_1. \quad (1.18)$$

où les paramètres F et N_1 correspondent aux termes des développements en série de perturbation mettant en cause les bandes de conduction supérieures. On les définit ainsi comme :

$$F = -\frac{1}{6}E'_p \left[\frac{2}{E'} + \frac{1}{E' - \Delta'} \right] + \frac{1}{2}K, \quad (1.19)$$

$$N_1 = -\frac{1}{3}E'_p \left[\frac{1}{E'} - \frac{1}{E' - \Delta'} \right] + \frac{1}{2}K', \quad (1.20)$$

$$E'_p = \frac{2}{m_e} |\langle \Gamma_1^c | p_x | \Gamma_4^c \rangle|^2. \quad (1.21)$$

où K et K' correspondent aux autres termes de la série de perturbation associés aux bandes plus éloignées en énergie³, E'_p est de nature analogue à E_p par sa définition et où E' et Δ' (identifiées sur la figure 1) correspondent respectivement à l'écart d'énergie entre les bandes de conduction Γ_7^c et Γ_6^c et les bandes Γ_8^c et Γ_7^c . Notons que l'étude de Hermann et Weisbuch [9] montre que la contribution relative de F à m_c^* (environ 10 %) est beaucoup plus grande que la contribution relative de N_1 à g_c^* (environ 1 %). Il en va de même pour les contributions de K et K' à F et N_1 respectivement. Notons également que F , N_1 , K et K' sont des paramètres ayant des valeurs négatives.

L'énergie des bandes de valence est donnée par une expression complexe comprenant les paramètres γ_1 , γ' , γ'' et κ que l'on résume en l'exprimant en termes de la masse effective des trous lourds et légers (sans tenir compte du spin) :

$$E_{a,b}^+[n] = -(n + \frac{3}{2})\hbar\omega_c \left(\frac{m_e}{m^+} \right), \quad n = -1, 0, 1, \dots \quad (1.22)$$

$$E_{a,b}^-[n] = -(n - \frac{1}{2})\hbar\omega_c \left(\frac{m_e}{m^-} \right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.23)$$

où $E_{a,b}^+$ désigne l'énergie de la bande trous légers, $E_{a,b}^-$ désigne l'énergie de la bande trous lourds et ω_c est la pulsation cyclotron de l'électron libre. Dans le cas où $n \gg 1$ et $\gamma', \gamma'' \ll \frac{E_p}{E_g}$, la masse effective des trous s'exprime simplement par :

$$\frac{m_e}{m^+} \simeq \frac{2}{3} \frac{E_p}{E_g} + \gamma_1 + \frac{1}{2} (\gamma' + 3\gamma''), \quad (1.24)$$

$$\frac{m_e}{m^-} \simeq \gamma_1 - \frac{1}{2} (\gamma' + 3\gamma''). \quad (1.25)$$

³ Dans la notation de la référence [9], les termes K et K' sont respectivement notés C et C' .

On constate que dans ces conditions, la faible masse effective des trous légers trouve son origine dans l'importance de son interaction avec la bande de conduction représentée par le terme $\frac{E_p}{E_g}$, alors que ce terme est absent dans le cas des trous lourds. Pour la même raison, la bande de trous lourds sera beaucoup plus sensible que la bande de trous légers à l'anisotropie introduite par les paramètres γ' et γ'' . Notons que les paramètres γ_1 , γ' et γ'' représentent l'interaction des bandes de valence avec les bandes de conduction supérieures. Il s'agit d'un rôle semblable à celui du paramètre F pour la bande de conduction.

Le premier niveau de Landau de la bande de trous légers $n = -1$ est un cas spécial. Son énergie est donnée par :

$$E_a^l [n = -1] \simeq -\frac{1}{2}\hbar\omega_c [\gamma_1 - \gamma' - \kappa] \quad (1.26)$$

$$E_b^l [n = -1] \simeq -\frac{1}{2}\hbar\omega_c [\gamma_1 + \gamma' - 3\kappa] \quad (1.27)$$

Contrairement aux autres niveaux de cette bande, l'absence du terme en $\frac{E_p}{E_g}$ pour le niveau $n = -1$ lui confère une masse effective comparable à celle des trous lourds. Si on soustrait les deux dernières équations, on obtient une expression proportionnelle au facteur- g effectif des trous dans cette bande.

$$E_a^l [n = -1] - E_b^l [n = -1] = -\frac{1}{2}\hbar\omega_c [2\gamma' - 2\kappa] \propto \frac{g_l^*}{g_e} \quad (1.28)$$

Le paramètre κ est de nature semblable à N_1 et représente la contribution des bandes de conduction supérieures au facteur- g effectif des trous. Notons également la présence du terme γ' qui introduit une partie de l'anisotropie du facteur- g .

1.4 Transitions optiques

Une technique efficace pour l'analyse de la structure de bande des semiconducteurs est l'étude de ses propriétés optiques. C'est pourquoi nous procédons maintenant à la description des transitions interbandes et de la résonance cyclotron. Étant l'objet principal de ce travail, la résonance de spin

des électrons de la bande de conduction sera traitée dans la section 1.5.

Notons également que la résonance cyclotron et la résonance de spin dans les bandes de valence ne seront pas traitées dans ce mémoire car les porteurs présents dans notre échantillon sont des électrons provenant d'un excédant d'impuretés de type donneur.

1.4 a) Les transitions interbandes

Les transitions interbandes regroupent toutes les transitions électroniques permises entre les bandes de valence et la bande de conduction. En présence d'un champ magnétique, la règle de sélection des transitions permises s'exprime simplement :

$$\Delta n = \pm 1. \quad (1.29)$$

De plus, les configurations d'excitation introduisent de nouvelles règles de sélection. On en distingue deux groupes :

- les transitions permises en **configuration Faraday**, le vecteur d'onde du photon incident étant **parallèle** au champ magnétique;
- les transitions permises en **configuration Voigt**, le vecteur d'onde du photon incident étant **perpendiculaire** au champ magnétique.

Pour nos mesures, nous n'avons utilisé que la configuration Faraday qui ne permet que les transitions à l'intérieur d'une même série (a ou b). Notons également que lorsque le photon incident est de polarisation circulaire gauche (PCG), seule la règle $\Delta n = +1$ s'applique, alors que l'opposé se produit en polarisation circulaire droite (PCD).

À partir du modèle, l'énergie à laquelle la transition entre le niveau $n + 1$ de la bande de trous lourds et le niveau n la bande de conduction se produit en configuration Faraday est donnée par :

$$\hbar\omega_{inter} = E_a^c[n] - E_a^-[n + 1] \quad (1.30)$$

$$= E_g + (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c \left(\frac{m_e}{m^*} \right) + (n - \frac{1}{2}) \hbar \omega_c \left(\frac{m_e}{m^-} \right), \quad (1.31)$$

$$= E_g + (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c \left[\frac{m_e}{m^*} + \frac{m_e}{m^-} \right] + \hbar \omega_c \left(\frac{m_e}{m^-} \right). \quad (1.32)$$

On voit clairement apparaître une série de transitions entre les niveaux de Landau des bandes de valence et de conduction dont l'écart en énergie est fonction de la masse effective des électrons et des trous qui sont mis en jeu. Puisque l'énergie des transitions interbandes est d'environ deux ordres de grandeur plus grande que l'énergie du terme zeeman (équ.1.13), nous négligeons ce dernier et ne considérons que les transitions sans renversement de spin, i.e. entre la bande de conduction et la bande de trous lourds d'une même série *a* ou *b*. D'autre part, puisque les bandes ne sont pas paraboliques, la variation des masses effectives en fonction du champ magnétique et de l'indice de Landau conduit à une dépendance non linéaire de l'énergie de transition envers le champ magnétique.

On représente souvent ces transitions par des diagrammes en éventail (comme la figure 4) formés de l'énergie de transition en ordonnée et du champ magnétique en abscisse. Ils permettent de mettre en évidence les niveaux de Landau et la non-parabolicité des bandes.

Puisque les transitions interbandes mettent en jeu la bande de conduction et les bandes de valence, il est possible, en principe, d'en déduire tous les paramètres du modèle développé précédemment. Toutefois, sur une base expérimentale, cette technique trouve ses limites. En effet, la gamme couverte par les écarts d'énergie entre différents niveaux est très large : ~ 1 eV entre les bandes de conduction et de valence, ~ 10 meV entre les niveaux de Landau et ~ 1 meV entre les configurations de spin. Ainsi, à cause des limites de précision imposées par les dispositifs expérimentaux, les paramètres N_1 , γ_1 , γ' , γ'' et κ ne peuvent être déterminés de façon très précise. L'utilisation des différentes configurations et polarisations de la lumière permettent toutefois d'améliorer sensiblement la détermination des paramètres [3] .

1.4 b) La résonance cyclotron

La résonance cyclotron met en cause les transitions intrabandes qui se produisent entre deux niveaux de Landau. La règle de sélection de ces transitions est également très simple : $\Delta n = \pm 1$. En

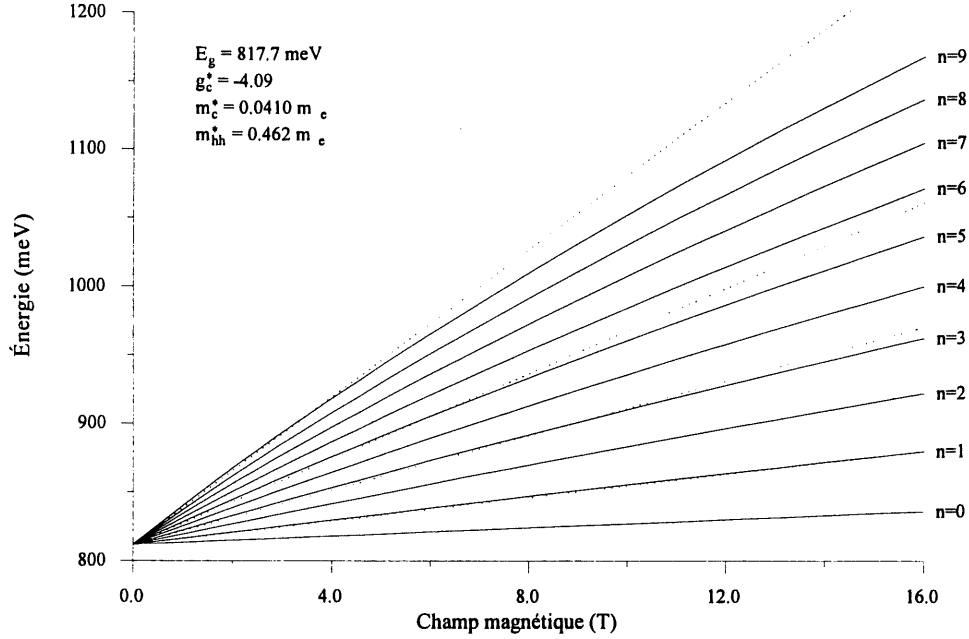


Figure 4 : Diagramme en éventail des niveaux de Landau tels que calculés à l'aide du modèle théorique. Les droites pointillées correspondent à des bandes paraboliques de même m_c^* pour $n = 1, 3, 5$ et 9 .

configuration Faraday, les transitions se produisent à l'intérieur d'une même série (a ou b) et seul un photon de polarisation circulaire gauche permet la résonance cyclotron. C'est d'ailleurs pourquoi cette polarisation est aussi appelée "cyclotron active" (PCA) par opposition à la polarisation circulaire droite dite "cyclotron inactive" (PCI).

L'énergie à laquelle se produit la résonance cyclotron entre les deux premiers niveaux de Landau de la bande de conduction est :

$$\hbar\omega_{RC} = E_a^c[1] - E_a^c[0] \simeq \frac{3}{2}\hbar\omega_c \left(\frac{m_e}{m^*[1]} \right) - \frac{1}{2}\hbar\omega_c \left(\frac{m_e}{m^*[0]} \right), \quad (1.33)$$

$$\simeq \hbar\omega_{RC} \left(\frac{m_e}{m_c} \right). \quad (1.34)$$

$$\frac{m_e}{m_{RC}} = \frac{1}{2} \left[3 \frac{m_e}{m^*[1]} - \frac{m_e}{m^*[0]} \right]. \quad (1.35)$$

où on a défini la masse cyclotron m_{RC} qui tient compte de la dépendance en énergie de la masse

effective des porteurs. Notons que si la bande est parabolique, la masse cyclotron devient simplement la masse effective des électrons de la bande. Dans cette équation, nous n'avons tenu compte que des deux premiers niveaux alors que la résonance cyclotron est possible pour toute paire consécutive de niveaux de Landau ($n \rightarrow n + 1$). Cette restriction est justifiée par la faible concentration des porteurs dans la bande de conduction constatée aux faibles températures d'expérimentation dans nos échantillons.

À partir des équations précédentes, il est évident que l'intérêt premier des expériences de résonance cyclotron est la mesure de la masse effective des électrons dans la bande de conduction. Ainsi, ce sont les paramètres de la bande de conduction E_g , E_p et F qui sont accessibles par ces mesures. La résonance cyclotron s'avère donc être un complément intéressant aux mesures interbandes, en ce qu'elle permet d'affiner la détermination des paramètres.

Finalement, le théorème de Kohn [18] nous permet de ne pas nous soucier de l'effet des interactions électron-électron sur les niveaux d'énergie de la bande de conduction. Dans notre type de matériaux et dans l'approximation dipolaire⁴, le champ électrique de l'onde incidente ne se couple qu'avec la partie de l'hamiltonien reliée au centre de masse. Cette partie de l'hamiltonien a la même forme que l'hamiltonien à un seul électron [19]. De ce fait, les niveaux d'énergie qui interviennent dans les processus d'absorption de photons ne sont autres que les niveaux de la structure de bande à un seul électron dont nous avons discuté à la section précédente. Nous appliquons les conclusions du théorème de Kohn pour l'ensemble des transitions optiques étudiées.

1.5 La résonance de spin

La résonance de spin se produit entre les deux états de spin (séries a et b) d'un même niveau de Landau. La condition de résonance de spin sert de définition au facteur- g effectif des électrons dans la bande de conduction :

$$\hbar\omega_{RS} = E_a^c[0] - E_b^c[0] = g^* \mu_B B \quad (1.36)$$

⁴ On considère le champ électrique de l'onde incidente constant sur un domaine beaucoup plus grand que la maille du cristal.

Dans la limite des très faibles champs magnétiques, la valeur de g^* tend vers g_c^* , tel que défini à l'équation 1.18. Comme dans le cas de la résonance cyclotron, la faible concentration de porteurs dans la bande de conduction nous limite à l'analyse de la résonance de spin sur le premier niveau de Landau, soit pour $n = 0$.

1.5 a) Les mécanismes permettant la résonance de spin

Dans un système de bandes de symétrie cubique sans couplage spin-orbite, la résonance de spin ne peut être obtenue qu'à l'aide d'une excitation dipolaire magnétique (RSDM). Toutefois, en présence de couplage spin-orbite, la résonance de spin induite par une interaction dipolaire électrique (RSDE) devient possible par le mélange des fonctions d'onde produit par les trois mécanismes suivants :

- par le terme $\vec{k} \cdot \vec{p}$ de l'hamiltonien, lié à la non-parabolicité des bandes;
- par l'absence de symétrie d'inversion (ASI), cas de notre composé;
- par l'anisotropie des bandes (A).

L'étude des éléments de matrice impliqués dans ces transitions montre que le coefficient d'absorption de la résonance dipolaire électrique est grandement supérieur à celui de la résonance dipolaire magnétique⁵. Pour cette raison, nous négligerons cette dernière. En raison du fait que les mécanismes permettant la résonance de spin ne sont que des perturbations, le coefficient d'absorption demeure toutefois très faible en comparaison à celui associé à la résonance cyclotron. On estime le premier inférieur à 2 cm^{-1} pour l'InSb [20] (concentration électronique de 10^{14} cm^{-3}) en comparaison à environ $\sim 10^2 \text{ cm}^{-1}$ pour le second.

Les différents mécanismes ont des caractéristiques fort différentes. D'une part, l'absence de symétrie d'inversion est le seul mécanisme permettant la transition à $\vec{k} = 0$. D'autre part, on attend du terme $\vec{k} \cdot \vec{p}$ une règle de sélection isotrope et favorable seulement en polarisation cyclotron inactive (ou PCD). Plusieurs études ont été menées pour déterminer l'efficacité de ces mécanismes à permettre la résonance de spin. Notamment, par l'analyse de l'anisotropie de la résonance de spin, Chen *et al.* [20] ont montré que l'absence de symétrie d'inversion constitue le mécanisme dominant pour la

⁵ Notons toutefois que Chen *et al.* [20] ont montré l'importance de tenir compte d'une interférence possible entre les deux processus dans l'étude de l'anisotropie du facteur- g électronique.

	PCG			PCD		
	ASI	$\vec{k} \cdot \vec{p}$	A	ASI	$\vec{k} \cdot \vec{p}$	A
$\vec{B} \parallel [100]$	Oui	Non	Non	Non	Oui	Non
$\vec{B} \parallel [110]$	Non	Non	Oui	Non	Oui	Non
$\vec{B} \parallel [111]$	Non	Non	Non	Oui	Oui	Non

Tableau 5 : Règles de sélection pour la résonance de spin selon les mécanismes et la configuration expérimentale. Tiré de [23] .

		Coefficient d'absorption α à la résonance ($\omega = \omega_{RS}$)	
ASI	(PCA)	$\propto \delta_o^2 BN \frac{m^*}{m_e} \frac{\chi}{(\chi+1)^2} [\cos 2\phi \cos 2\theta - \frac{i}{2} \sin 2\phi \cos \theta (2 - 3 \sin^2 \theta)]^2$	
	(PCI)	$\propto \delta_o^2 BN \frac{m^*}{m_e} \frac{\chi}{(\chi-1)^2} [\sin 2\phi \sin \theta \sin 2\theta]^2$	
$\vec{k} \cdot \vec{p}$	(PCA)	0	
	(PCI)	$\propto g_c^* \frac{N^3}{B} E_p^2 \left[\frac{1}{E_g^2} - \frac{1}{(E_g + \Delta)^2} \right]^2$ (isotrope)	
RSDM	(PCA)	0	
	(PCI)	$\propto (g_c^*)^3 nBN$ (isotrope)	

Tableau 6 : Coefficients d'absorption à la condition de résonance de spin en configuration Faraday pour les différents mécanismes. n est l'indice de réfraction, N est la concentration électronique, ϕ et θ les coordonnées sphériques repérant \vec{B} par rapport à la direction $[100]$ du cristal. $\chi = \frac{g_c^* m^*}{2 m_e}$ est le rapport entre l'énergie de la transition de spin et l'énergie du premier niveau de Landau. Ces équations sont valides pour $g_c^* < 0$. Les abréviations PCA et PCI désignent respectivement un éclairage en polarisation cyclotron active ou inactive (voir section 1.4 b)). Tiré de [20, 24–26]

résonance de spin. Notons également que, suivant d'autres travaux de Chen *et al.* [21] et de Ogg, [22] le facteur- g devrait varier d'au plus 10 % (à ~ 10 Tesla) selon l'orientation du semiconducteur, être maximal lorsque \vec{B} est parallèle à $[100]$ et minimal suivant $[111]$. Le tableau 5, tiré de [23] , résume les principales règles de sélection pour la résonance de spin.

Des différences existent également entre les coefficients d'absorption reliés aux trois mécanismes dans leur dépendance en champ magnétique et en concentration électronique. Ces caractéristiques, résumées pour la configuration Faraday par le tableau 6, permettent également de distinguer les mécanismes mis en cause [24–26] .

1.5 b) La résonance de spin des impuretés

Certains auteurs ont observé la présence de deux ou trois structures dans leurs mesures de résonance

de spin (particulièrement dans l'InSb où la finesse des pics de résonance permet une très grande résolution) [27]. L'une des structures est reliée à la résonance de spin des électrons de conduction (RS) et l'autre est associée à la résonance de spin des électrons piégés sur les sites donneurs. La résonance de spin sur les états d'impuretés (RSI) est possible et a été étudiée par plusieurs auteurs. Nous rappelons maintenant les principales conclusions de l'étude faite par Barticevic *et al.* [27]. Les niveaux d'énergie d'une impureté sont altérés par le potentiel des atomes du semiconducteur. Les niveaux donneurs prennent en grande partie la symétrie du cristal qui l'entoure. Les niveaux d'impuretés situés près de la bande de conduction auront donc des caractéristiques semblables à cette dernière. On s'attend donc à ce que le facteur- g effectif des électrons liés aux sites donneurs (g_i^*) soit de grandeur comparable au facteur- g effectif des électrons de conduction (g_c^*). L'étude de Barticevic *et al.* montre que l'écart entre g_i^* et g_c^* est presque indépendant de l'orientation du cristal par rapport au champ magnétique. Les deux facteur- g effectifs sont donc caractérisés par une anisotropie très semblable. D'autre part, bien qu'il soit difficile de comparer le coefficient d'absorption de la RSI à celui de la RS, l'expérience menée par les mêmes auteurs montre qu'ils possèdent tous deux la même anisotropie. La principale distinction entre les deux types de résonance provient des mécanismes qui les rendent possibles : alors que trois mécanismes permettent la RS (page 23), seul l'absence de symétrie d'inversion permet la RSI [28].

Sur le plan expérimental, la meilleure méthode pour distinguer l'origine des structures de résonance de spin observées demeure l'étude de la dépendance de leur amplitude en fonction de la température, du champ magnétique, de la concentration de porteurs et d'impuretés. Par exemple, à mesure que la température augmente, un nombre grandissant d'électrons sont libérés des impuretés, contribuant ainsi à augmenter l'amplitude de la RS et à diminuer l'amplitude de la RSI. Le champ magnétique a l'effet contraire, car il augmente l'énergie de liaison des électrons aux sites donneurs. Finalement, l'augmentation ou la diminution des concentrations de porteurs ou d'impuretés a un effet correspondant sur l'amplitude respective de la RS ou de la RSI.

1.5 c) L'effet Overhauser

Plusieurs auteurs ont rapporté l'observation d'une polarisation nucléaire induite importante lors

de mesures de résonance de spin par pompage optique (entre autres [29]). En effet, par le biais de l'interaction hyperfine, il est possible de polariser les noyaux atomiques du semiconducteur en portant la polarisation électronique hors de son état d'équilibre (le lecteur peut se référer à Reif [30]). Lorsque présente, cette polarisation nucléaire dynamique se manifeste comme un champ magnétique effectif B_N qui modifie la position de la résonance de spin. Il est ainsi important de savoir si une telle polarisation nucléaire peut être présente lors de nos expériences.

Les auteurs qui ont étudié ou observé l'effet Overhauser montrent que le champ magnétique engendré par les noyaux fortement polarisés peut s'élever à quelques dixièmes de tesla. De tels champs peuvent certainement fausser la détermination de la position de la résonance de spin. Toutefois, ils montrent également que le temps de relaxation/polarisation des spins nucléaires est grand, de l'ordre de 1000 s [31] . Cela signifie que pour obtenir une polarisation nucléaire importante, il faut maintenir la condition de résonance de spin pendant environ 30 minutes.

Or dans le cadre de nos expériences, le temps de passage à la condition de résonance de spin était inférieur à 100 s ce qui ne permet pas à la polarisation nucléaire d'atteindre des valeurs appréciables. Ainsi, nous sommes d'avis que nous pouvons négliger l'effet Overhauser dans l'analyse de nos résultats. Aucune observation expérimentale ne nous incite d'ailleurs à présumer du contraire.

1.6 Les contraintes mécaniques externes et internes

L'application d'une pression hydrostatique ou axiale se révèle être un outil de grand intérêt dans l'étude des propriétés des semiconducteurs. Ces contraintes mécaniques permettent de modifier la structure de bande sans changer la composition de l'échantillon, la concentration d'impuretés et la position de celles-ci dans la matrice du semiconducteur. En plus d'être continue et réversible, l'application d'une pression peut causer la levée de certaines dégénérescences de la structure de bande.

Nous verrons maintenant les principaux effets de différents types de contraintes sur la structure cristalline et sur la structure de bande. Puis, nous terminerons en exposant les effets attendus de l'application d'une pression hydrostatique sur la résonance de spin.

1.6 a) La déformation du cristal sous différentes contraintes

L'application d'une pression axiale sur un semiconducteur déforme sa structure cristalline. Par exemple, une pression appliquée à un cristal du groupe T_d (maille cubique) suivant l'axe $[100]$ le fera passer au groupe D_{2d} (maille tétragonale) ou, suivant l'axe $[111]$ vers le groupe D_{3d} (maille rhomboédrique). Évidemment, la structure de bande est modifiée par de tels changements de symétrie qui conduisent notamment à la levée de certaines dégénérescences. Toutefois, si la pression axiale appliquée n'induit qu'une faible déformation de la structure cristalline, on ne devrait observer que de faibles modifications de la structure de bande et des paramètres qui la décrivent.

L'application d'une pression hydrostatique produit une déformation isotrope du cristal sur lequel elle est appliquée. Cette déformation ne fait que réduire le volume de la cellule unité sans en changer les propriétés de symétrie, sauf si une transition de phase induite par la pression se produit. On s'attend donc à voir une modification des paramètres de la structure de bande, sans pour autant que ses caractéristiques générales ne soient modifiées.

Lorsque la pression hydrostatique est appliquée sur un semiconducteur déposé sur un substrat de composition différente, la différence entre les constantes élastiques des deux matériaux peut introduire des tensions internes et cela, même si l'accord de maille entre les deux matériaux était initialement parfait. Ainsi, si le substrat est moins compressible que le composé de la couche épitaxiale, la pression hydrostatique introduit une tension biaxiale⁶ dans cette dernière.

D'autre part, si les matériaux ne sont pas en accord de maille parfait, à cause notamment des limitations des techniques de fabrication, une tension ou une compression biaxiale se trouve introduite dans la couche épitaxiale, même en absence de toute contrainte externe. Pour un désaccord de maille d'un dixième de point de pourcentage, la tension/compression interne peut s'élever à près d'un kilobar dans le cas de l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ sur un substrat d' InP . Suivant l'analyse du paragraphe précédent, l'application d'une pression hydrostatique peut, sur une telle structure, réduire ou augmenter une tension/compression biaxiale déjà existante, suivant la compressibilité respective des couches et le type de contraintes initialement présentes.

⁶ Notons qu'une tension biaxiale dans un plan $\{110\}$ produit une déformation que l'on peut associer à la superposition d'une compression axiale suivant l'axe $[001]$ et d'une pression hydrostatique négative de même amplitude.

1.6 b) La déformation de la structure de bande par la pression hydrostatique

Commençons d'abord par rappeler quelques principes de base entourant la formation des bandes⁷. Les liens chimiques formant les composés III-V mettent en jeu les orbitales s et p des atomes du cristal⁸. Considérons les niveaux s et p de deux atomes (de Ga et d'As par exemple) situés à grande distance l'un de l'autre. Les niveaux s sont pleins (2 électrons) et les niveaux p au tiers remplis (2 électrons sur 6 états disponibles). On sait qu'en rapprochant les atomes, l'interaction entre les électrons peuplant les orbitales entraînera l'hybridation de celles-ci en orbitales liantes (s_L , p_L) et anti-liantes (s_{AL} , p_{AL}). À cause du principe d'exclusion de Pauli, l'écart d'énergie entre les orbitales hybrides s_L et s_{AL} tend à augmenter à mesure que la distance entre les atomes diminue. Il en va de même pour les deux orbitales hybrides de type p . La théorie montre de plus que dans les semiconducteurs de la famille des III-V, les niveaux de type p (de symétrie Γ_7 et Γ_8) se déforment beaucoup moins, sous l'effet d'une pression hydrostatique, que les niveaux de type s (de symétrie Γ_6) [33].

Dans les semiconducteurs III-V, les niveaux p_L passent sous les niveaux s_{AL} lorsque les atomes ne sont plus qu'à quelques angströms d'écart. L'inversion des niveaux permet aux huit électrons présents de trouver une configuration de moindre énergie en remplissant complètement les niveaux s_L et p_L et en laissant libres les niveaux anti-liants.

En appliquant ce développement à un grand nombre d'atomes placés dans un réseau cristallin, les conclusions sont semblables : des états liants et anti-liants se forment toujours et se regroupent cette fois en bandes d'énergie. La bande de conduction sera associée aux états hybrides s_{AL} (dépeuplés), les bandes de valence aux états p_L (saturés). Aussi, les bandes de conduction supérieures sont associées aux états p_{AL} et la bande de valence profonde aux états s_L .

Reprenons finalement nos atomes de Ga et d'As, mais en les plaçant cette fois à la distance correspondant à la maille cristalline. L'application d'une pression hydrostatique aura pour effet de les rapprocher. On s'attend de ce fait à ce que les niveaux s_L et s_{AL} s'éloignent davantage l'un de

⁷ On peut également se référer à [12, 32].

⁸ Plus particulièrement, les niveaux mis en cause dans l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ sont les suivants : $4s$ et $4p$ pour As et Ga ; $5s$ et $5p$ pour In.

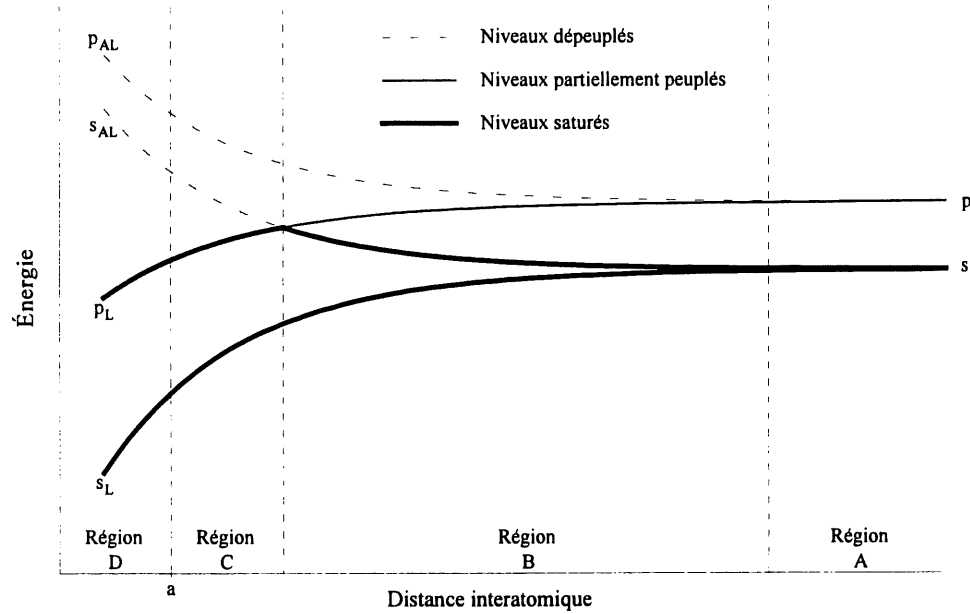


Figure 5 : Déplacement des niveaux d'énergie moléculaires par la pression hydrostatique. Région a) Deux atomes éloignés: les niveaux atomiques sont inchangés. Région b) Les niveaux forment des bandes. Les niveaux liants s'éloignent des niveaux anti-liants. Région c) Les niveaux de type s_{AL} et p_L s'inversent donnant naissance à la bande de conduction et aux bandes de valence. Région d) Avec l'application d'une pression externe, les niveaux s_{AL} et p_L s'éloignent (E_g augmente) alors que les niveaux s_{AL} et p_{AL} se rapprochent (E' diminue).

l'autre sous l'effet de la pression et que les niveaux p_L et p_{AL} fassent de même. Toutefois, nous ne sommes pas en mesure de connaître intuitivement le déplacement en énergie des niveaux de type s par rapport aux niveaux de type p .

Bien que très simple, cette discussion sur les déformations des niveaux causées par la pression nous permet de comprendre le déplacement relatif des bandes dans le cristal semiconducteur. Dans le cas de l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, les mesures montrent que la bande interdite (E_g) s'accroît en énergie avec l'augmentation de la pression. Ce comportement s'explique facilement en se rappelant la présence de l'inversion des états s_{AL} et p_L et le fait que les états de type p s'éloignent moins rapidement les uns des autres que les états de type s . La figure 5 illustre cette réflexion. Suivant la même logique, cette illustration nous permet également d'anticiper la diminution de la bande interdite située entre la bande de conduction et les bandes de conduction supérieures (E') sous l'effet d'une pression

hydrostatique.

1.6 c) Les effets de la pression sur la résonance de spin

Dans leurs travaux, La Rocca, Kim et Rodriguez [34] définissent un hamiltonien de couplage spin-orbite induit par la présence d'une pression axiale sur le cristal étudié. Ce terme de type $\vec{k} \cdot \vec{p}$ constitue un nouveau mécanisme permettant la résonance de spin par le mélange des fonctions d'onde. Les auteurs montrent que, pour une pression axiale de 1 *kbar* sur l'InSb, le coefficient d'absorption lié au terme de déformation peut être d'un ordre de grandeur supérieur au coefficient d'absorption dû à l'absence de symétrie d'inversion (sans pression).

Se rappelant que de telles tensions internes non hydrostatiques peuvent être introduites par les procédés de fabrication des semiconducteurs, on se doit donc de conclure que les tensions internes au cristal peuvent grandement affecter l'amplitude de la résonance de spin. L'application d'une pression hydrostatique qui, dans certains cas peut modifier les tensions internes existantes, peut également influencer le coefficient d'absorption de la résonance de spin.

Chapitre 2

Méthode expérimentale

Ce chapitre a pour but de décrire brièvement les méthodes expérimentales utilisées pour la présente étude. Nous établirons d'abord les liens qui existent entre le spectre d'absorption et la photoconductivité, puis nous décrirons les installations et procédures nécessaires à la mesure des spectres de transition interbandes, de la résonance cyclotron et de la résonance de spin. Nous décrirons ensuite la technique de mise sous pression hydrostatique et terminerons par la méthode d'ajustement des paramètres du modèle aux données expérimentales.

2.1 Spectre d'absorption et photoconductivité

La mesure de spectres d'absorption pose certains défis techniques. D'abord, le montage expérimental doit permettre l'entrée de la lumière et sa sortie une fois l'échantillon traversé. Deuxièmement, les appareils de mesure du signal transmis doivent être suffisamment sensibles pour enregistrer les faibles variations d'intensité dues à l'absorption. Ce taux d'absorption est lié à l'épaisseur de l'échantillon et donc aux limites techniques de fabrication de l'échantillon. Ainsi, dans le cas de la résonance de spin dans l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, dont le coefficient d'absorption est inférieur à 5 cm^{-1} , il faudrait un échantillon de l'ordre d'un centimètre d'épaisseur pour rendre possible l'observation directe de l'absorption, alors que notre échantillon ne fait que $5 \mu\text{m}$ d'épaisseur. C'est pourquoi on se tourne vers la mesure de la photoconductivité qui permet une plus grande sensibilité de mesure de l'absorption.

La photoconductivité repose sur la sensibilité de la conductivité électrique de l'échantillon aux changements de population de porteurs dans les différentes bandes. Soulignons que le signal de photoconductivité est grandement influencé par l'impédance de l'échantillon (incluant la magnétorésistance), par les variations de l'énergie de liaison des impuretés et par les phénomènes reliés au gel magnétique. Comme plusieurs de ces phénomènes sont fonction de la température, de l'intensité du

courant et du champ magnétique, il est très difficile d'en tenir rigoureusement compte. La forme des structures observées est ainsi tributaire d'un nombre important de mécanismes qui affectent la conduction, ce qui limite grandement la portée de toute comparaison quantitative entre l'intensité et la forme du signal de photoconductivité d'une part, et, d'autre part, et l'amplitude et la forme du signal d'absorption optique. Toutefois, on peut montrer expérimentalement que le pic de photoconductivité coïncide avec le pic d'absorption optique dans le cas des transitions interbandes [5] et de la résonance cyclotron [6]. Nous présumons par conséquent qu'il en va de même pour la résonance de spin.

Puisqu'il s'agit d'une mesure de la conductivité électrique, l'échantillon est branché sur un circuit de mesure dans une des différentes configurations représentées par la figure 6. Dans la configuration à tension constante, on place une résistance beaucoup plus faible que la résistance de l'échantillon en parallèle avec celui-ci. On alimente ce circuit avec un courant constant produit par une source de courant Keithley 220. Le signal de photoconductivité est obtenu par la mesure du courant circulant dans l'échantillon à l'aide d'un détecteur synchrone (Stanford Research Systems SR830, SR850)⁹. Les mesures à courant constant à quatre pointes permettent de s'affranchir de la résistance des contacts et sont souvent moins bruyantes que les mesures à deux pointes, mais elles nécessitent un échantillon de forme particulière. Dans la configuration à courant constant à deux pointes, la source de courant alimente directement l'échantillon et le signal de photoconductivité est obtenu par la mesure de la tension aux bornes de l'échantillon à l'aide des mêmes appareils de détection synchrone. L'analyse des mesures préliminaires nous ont fait préférer cette dernière configuration à la précédente.

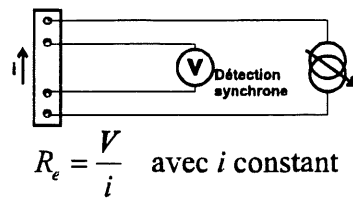
2.2 La détection synchrone et la technique du ratio en temps réel

La sensibilité de nos mesures est due en grande partie à l'utilisation de la technique de détection synchrone. Cette technique consiste à moduler l'excitation et à mesurer la composante de Fourier du signal à la fréquence de la modulation. Dans notre montage, on module la lumière incidente à l'aide d'un hacheur dont la fréquence est choisie de manière à minimiser le bruit parasite. On

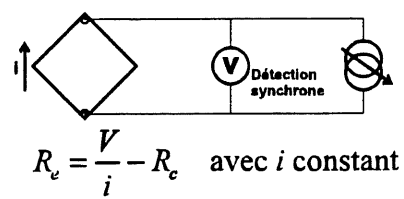
⁹ La fréquence de mesure correspond à la fréquence de modulation du faisceau laser incident. Nous y reviendrons dans la prochaine section.

Circuit de mesure à courant constant :

Mesure à 4 pointes :



Mesures à 2 pointes :



Circuit de mesure à tension constante :

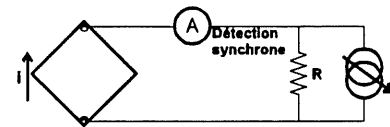


Figure 6 : Circuit servant aux mesures de photoconductivité. R_e désigne la résistance de l'échantillon, R_c , la résistance des contacts électriques, i , le courant qui circule dans l'échantillon et V , la tension appliquée à l'échantillon.

obtient ainsi une mesure de la différence entre le signal obtenu avec et sans illumination. Toujours dans notre cas, cela correspond à l'effet de la lumière incidente sur la conductivité de l'échantillon : sa photoconductivité.

Dans le cas du montage de transmission, le signal est également mesuré par détection synchrone. On obtient ainsi la différence d'intensité entre le signal résiduel du détecteur et la lumière transmise. Cette technique nous permet donc d'éliminer le problème de la détermination du niveau zéro du détecteur.

La seconde contribution importante à la sensibilité des mesures vient de l'utilisation d'une technique de ratio en temps réel. Elle consiste à mesurer simultanément le signal provenant de l'échantillon et l'intensité de la lumière émise par la source utilisée. Ces deux signaux sont enregistrés séparément par un ordinateur qui les affiche en temps réel et qui affiche également le ratio signal/référence calculé numériquement. C'est ce ratio, reconstitué à partir des deux signaux enregistrés par l'ordinateur, qui est utilisé pour l'analyse des mesures. Dans la mesure où les deux détecteurs utilisés ont

une réponse qui varie linéairement avec l'intensité lumineuse incidente, ce qui est notre cas, cette technique nous permet d'éliminer les fluctuations du signal qui ne sont pas reliées à l'échantillon, mais bien au reste du montage dont principalement :

- les fluctuations de tension de l'alimentation électrique des sources lumineuses;
- la forme du spectre d'émission de la lampe halogène (mesures de transitions interbandes);
- les fluctuations de l'intensité de l'émission du laser moléculaire (mesures intrabandes).

2.3 Montage expérimental

2.3 a) L'échantillon

L'échantillon utilisé pour toutes les mesures, O803B, est une couche d' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ de $5\ \mu\text{m}$ d'épaisseur déposée sur un substrat d'InP ($0.4\ \text{mm}$ d'épaisseur). La couche épitaxiale a été déposée par pyrolyse d'organo-métalliques dans les laboratoires de Bell-Northern Research [35, 36]. L'échantillon forme un carré de $4\ \text{mm} \times 4\ \text{mm}$ et sa surface est parallèle au plan cristallographique (001). Des contacts ohmiques d'indium ont été réalisés sur la couche épitaxiale aux quatre coins de l'échantillon.

Avec une concentration en gallium de 47 %, la couche épitaxiale est en accord de maille avec le substrat. Des mesures de double diffraction aux rayons-X ont toutefois montré un désaccord de maille $\frac{\Delta a}{a}$ de -7×10^{-4} à la température ambiante. En utilisant les constantes élastiques de l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ et de l'InP [46], on peut montrer que ce désaccord de maille génère, à température ambiante, une tension biaxiale d'environ $0.7\ \text{kbar}$ dans le plan de l'interface. Faute de connaître les constantes élastiques à basse température de ces matériaux, nous ne pouvons savoir la valeur exacte du désaccord de maille ou de la tension induite à $4\ \text{K}$, notre température de mesure. Par conséquent, on ne peut non plus connaître précisément l'effet à basse température de la pression hydrostatique sur la tension biaxiale induite par le désaccord de maille. Toutefois, comme l'InP et l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ ont des constantes élastiques semblables, on peut présumer que l'ordre de grandeur de la tension biaxiale interne est le même à basse température qu'à température ambiante.

Bien que l'échantillon ne fut pas intentionnellement dopé lors de la croissance, il est caractérisé par une concentration résiduelle d'impuretés non compensées ($N_D - N_A$) d'environ $2.5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Ce sont ces impuretés qui, partiellement ionisées aux températures expérimentales (1 % à 4.2 K), alimentent la bande de conduction en porteurs lors des expériences de résonance cyclotron et de résonance de spin.

2.3 b) Le champ magnétique

Le champ magnétique est généré par un aimant supraconducteur formé de deux enroulements concentriques : l'enroulement extérieur est fait de NbTi et l'enroulement intérieur de NbSn, qui a un champ critique supérieur. À 4 K, ce dispositif permet d'obtenir un champ magnétique de 14 T constant et uniforme à 0.1 % dans une sphère d'un centimètre de diamètre. En abaissant la température de l'aimant à 2 K, on peut atteindre 16 T avec le même dispositif.

2.3 c) Le cryostat

Le cryostat est formé de deux chambres presque complètement séparées, l'une recevant l'aimant supraconducteur et l'autre l'échantillon. Cette particularité nous permet de contrôler indépendamment la température dans les deux chambres et de réduire la consommation d'hélium liquide. En abaissant la pression à l'intérieur du cryostat de l'échantillon, on peut atteindre une température de 1.5 K. La température de l'échantillon est mesurée par des capteurs calibrés placés à proximité.

2.3 d) La pression hydrostatique

La pression hydrostatique est appliquée sur l'échantillon à l'aide d'une cellule de pression à milieu liquide. Celle-ci est formée d'un corps cylindrique creux bouché à une extrémité par une fenêtre de saphir, offrant un accès optique à l'échantillon, et à l'autre extrémité, par un piston (figure 7). Le piston sert également de support au porte-échantillon. La pression hydrostatique est créée en remplissant la cavité de liquide et en enfonçant le piston à l'aide d'une presse hydraulique. Le piston est ensuite fixé par un écrou de blocage.

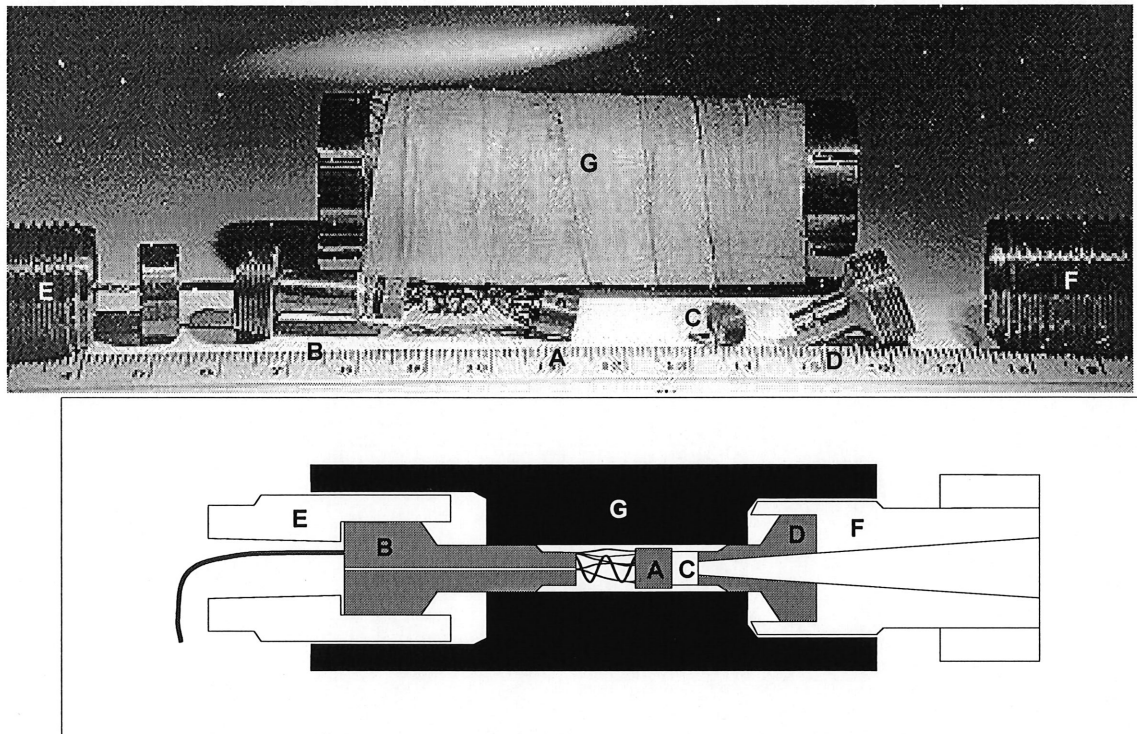


Figure 7 : Schéma de la cellule à pression hydrostatique. **A-** Porte-échantillon. **B-** Piston. **C-** Fenêtre de saphir. **D-** Cône d'entrée de la lumière et support à la fenêtre de saphir. **E-** Écrou de blocage du piston. **F-** Écrou de blocage de la fenêtre. **G-** Corps de la cellule à pression.

Afin de préserver le caractère hydrostatique de la pression, il est important de choisir un liquide qui ne se solidifie pas à température ambiante sous l'effet de la pression appliquée et qui se solidifie sous forme amorphe lorsqu'il est porté à basse température. Nous utilisons un hydrocarbure léger qui remplit ces conditions. Une jauge à pression située sous l'échantillon et constituée d'un barreau d'InSb calibré sert à la mesure *in situ* de la pression hydrostatique appliquée.

2.3 e) Le porte-échantillon

Pour les mesures sous pression, l'échantillon est monté sur un support circulaire, percé de tiges de cuivre servant de contacts électriques (figure 8). Les tiges de cuivre sont recouvertes de vernis qui les isole du support. Elles sont soudées, à l'arrière du support, à des fils de cuivre qui se rendent jusqu'aux appareils de mesure. L'échantillon est également isolé de son support par une mince feuille de Kapton. Les contacts entre les tiges de cuivre et l'échantillon sont assurés par des fils d'or ($25\ \mu\text{m}$ de diamètre) fixés à l'aide de laque d'argent.

Pour les mesures à pression atmosphérique, l'échantillon est monté sur un porte-échantillon en laiton similaire au précédant mais de taille légèrement plus grande.

2.4 Mesures du spectre de transitions interbandes

Les transitions interbandes dans l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ se situent dans la gamme des énergies supérieures à $800\ \text{meV}$ correspondant aux longueurs d'ondes inférieures à $1600\ \text{nm}$ (proche infrarouge). Une simple ampoule de projecteur suffit pour produire une lumière de puissance suffisante dans la gamme de longueur d'onde voulue. On fait converger cette lumière blanche (après passage dans le hacheur utilisé pour la détection synchrone) sur l'entrée d'un monochromateur (modèle DIGIKRÖM 240) pour faire une sélection de longueur d'onde. On peut obtenir ainsi un faisceau monochromatique à $\pm 0.5\ \text{nm}$ centré avec une précision de $0.5\ \text{nm}$.

À sa sortie du monochromateur, le faisceau est dirigé dans un tube de laiton poli qui l'achemine vers l'échantillon situé dans le cryostat (figure 9). Afin de minimiser les pertes de puissance dans

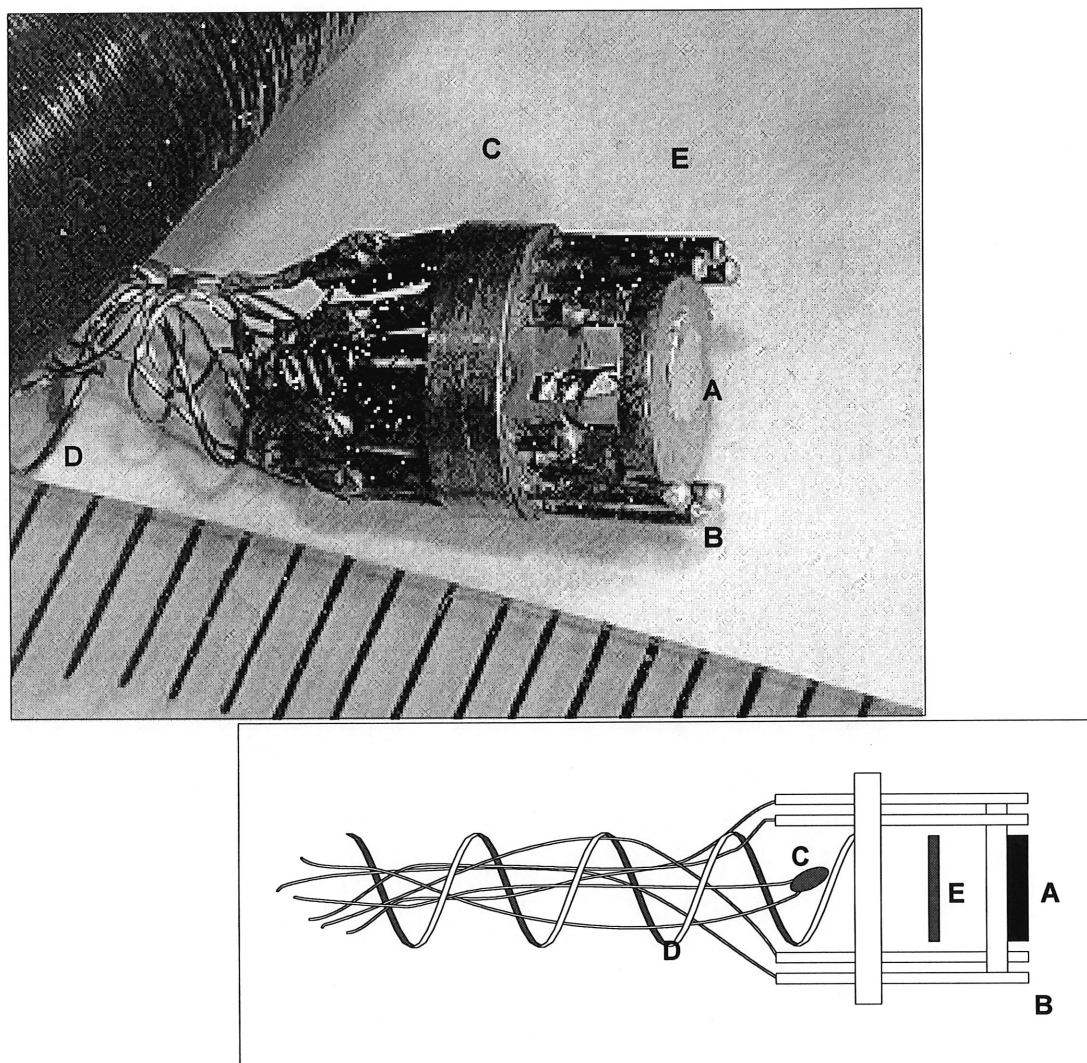


Figure 8 : Porte-échantillon pour les mesures sous pression. **A-** Plateau de fixation de l'échantillon. **B-** Tiges de cuivre servant de contacts à l'échantillon. **C-** Thermocouple. **D-** Ressort assurant une pression contre la fenêtre de saphir. **E-** Jauge à pression (barreau d'InSb).

l'air¹⁰, le monochromateur est purgé par de l'azote gazeux et le vide est fait dans le tube de laiton qui conduit la lumière jusqu'à l'échantillon.

D'autre part, il importe de tenir compte du spectre d'émission de la lampe, ainsi que des pertes liées au monochromateur qui se superposent au signal de photoconductivité de l'échantillon. Pour ce faire, on mesure, simultanément à la photoconductivité de l'échantillon, l'intensité de la lumière à la sortie du monochromateur à l'aide d'un détecteur à base de Ge ou d'InAs (maintenu à 77 K pour limiter le bruit thermique). Cette référence est utilisée comme dénominateur dans la technique de ratio décrite à la section précédente.

Les mesures du spectre de photoconductivité interbande sont réalisées de façon conventionnelle en faisant varier, à champ magnétique fixe, la longueur d'onde de la lumière incidente sur l'échantillon. À chaque fois que l'énergie correspond à une transition permise, on observe une variation la photoconductivité. L'analyse des structures permet d'obtenir l'énergie des transitions interbandes à $\vec{k} = 0$ pour un champ magnétique donné. Dans la prochaine section, nous comparerons cette procédure à celle utilisée pour les mesures dans l'infrarouge lointain.

2.5 Mesures de la résonance cyclotron et de la résonance de spin

La résonance cyclotron et la résonance de spin font intervenir des énergies beaucoup plus faibles que les transitions interbandes : moins de 50 meV dans le premier cas et moins de 5 meV dans le second. Ainsi, pour observer la résonance cyclotron à un champ magnétique d'environ 7 T, on doit utiliser une onde électromagnétique de longueur d'onde située entre 70 μm et 150 μm . Dans le second cas, nous avons recours à la lumière de longueur d'onde située entre 250 μm et 500 μm pour observer la résonance de spin à un champ magnétique inférieur au champ critique de l'aimant supraconducteur, soit 16 T dans notre cas.

Cette gamme de longueur d'onde située dans l'infrarouge lointain est produite par un laser moléculaire activé par un laser CO₂ (figure 10). Cette source ne donne accès qu'à un nombre limité de raies d'émission laser d'intensité suffisante, comme en fait état le tableau 7. Il faut ainsi adopter

¹⁰ Particulièrement l'absorption par le CO₂ et la vapeur d'eau qui sont importantes vers 1400 nm.

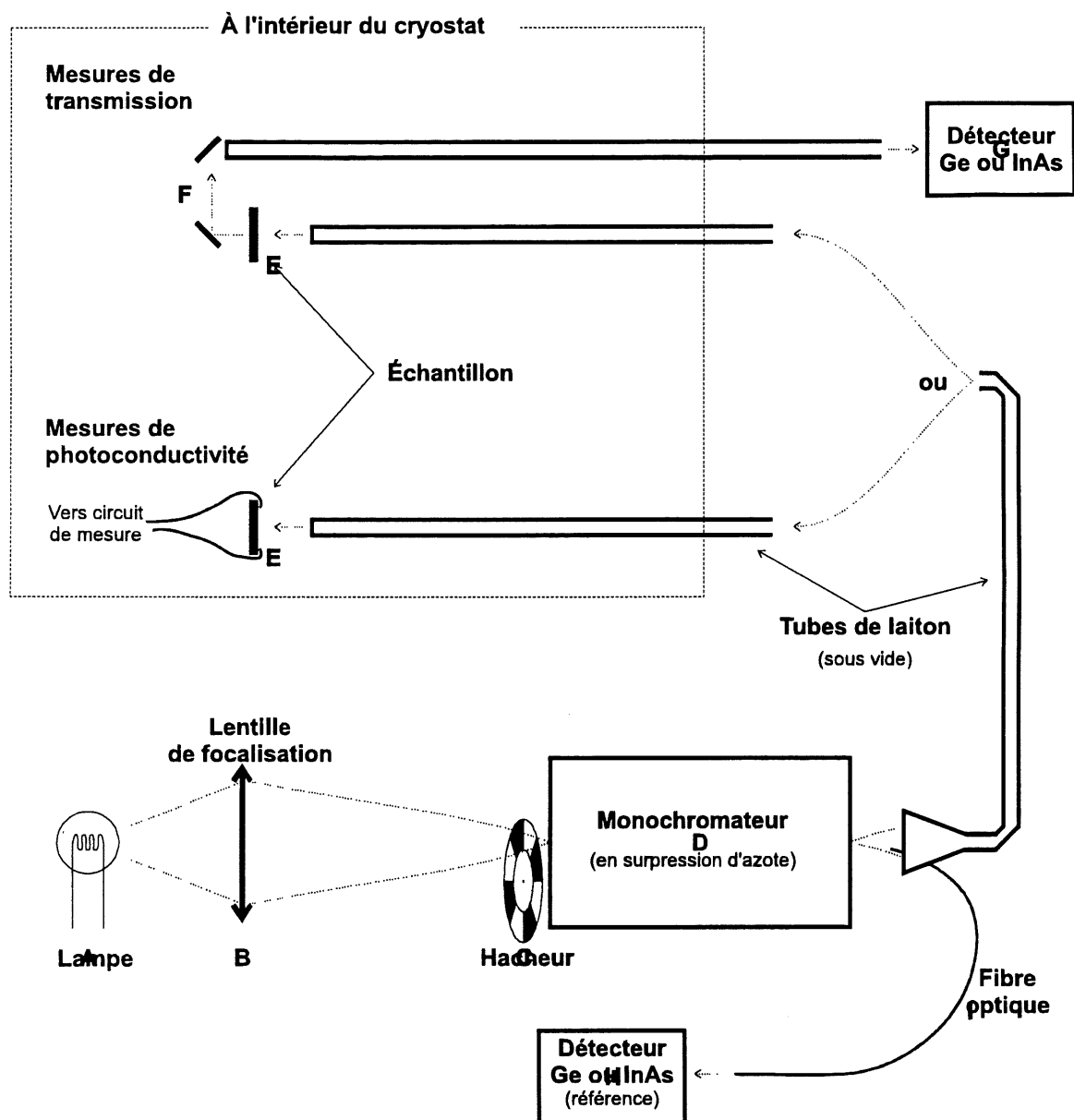


Figure 9 : Montage expérimental spécifique aux mesures interbandes.

Résonance cyclotron			Résonance de spin		
λ (μm)	$\hbar\omega$ (meV)	Gaz utilisé	λ (μm)	$\hbar\omega$ (meV)	Gaz utilisé
70.50	17.69	CH_3OH	410.7	3.02	CD_3I
96.50	12.85	CH_3OH	444.4	2.79	CD_3I
118.80	10.44	CH_3OH	460.6	2.69	CD_3I
133.12	9.31	CH_3OH	490.4	2.53	CD_3I
163.03	7.60	CH_3OH	508.4	2.44	CH_3I
267.40	4.64	CH_3OH	556.9	2.23	CD_3I
			570.6	2.17	CH_3OH
			599.6	2.07	CD_3I

Tableau 7 : Raies d'émission du laser moléculaire utilisées pour la résonance cyclotron et la résonance de spin.

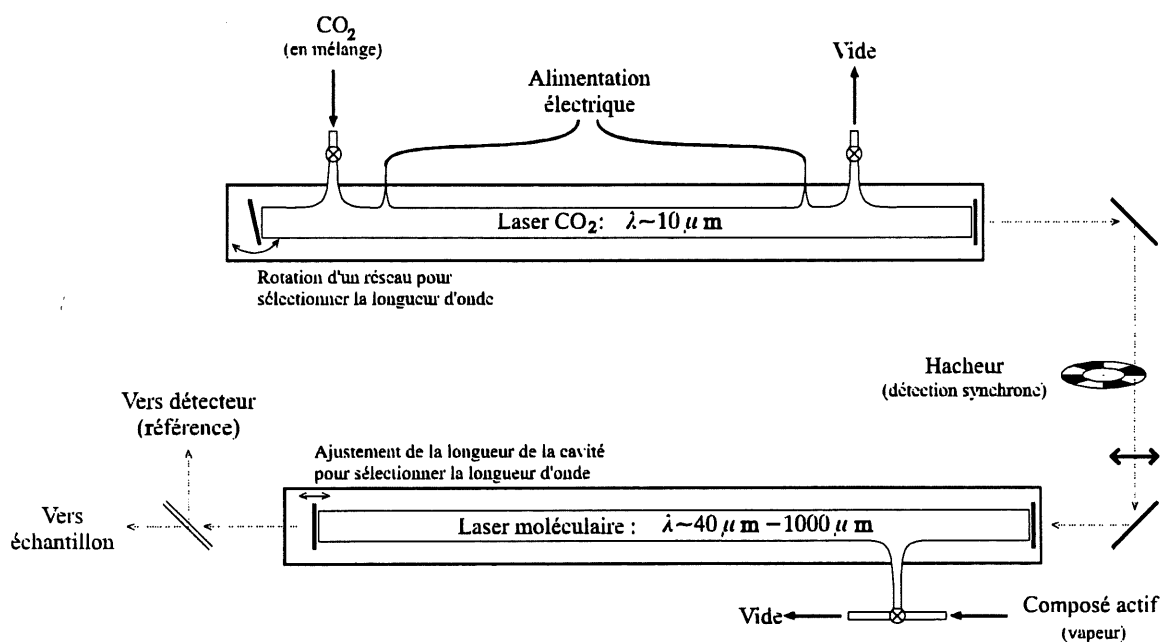


Figure 10 : Schéma du laser moléculaire.

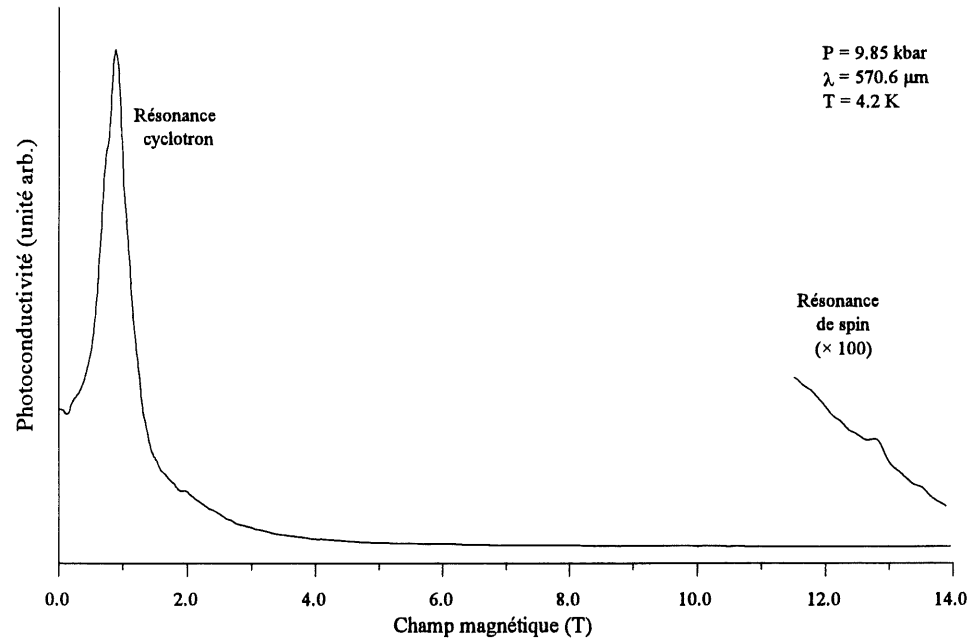


Figure 11 : Mesure de photoconductivité montrant à la fois la résonance cyclotron et la résonance de spin.

une procédure différente de celle utilisée pour les spectres de transitions interbandes : on choisit une raie d'émission laser, puis on effectue un balayage en champ magnétique. Dans ce contexte, ce sont les différents niveaux, dont l'énergie augmente avec le champ magnétique, qui entrent successivement en résonance avec l'onde électromagnétique incidente d'énergie fixe. Comme le montre la figure 11, on observe la résonance cyclotron à plus bas champ magnétique que la résonance de spin.

Il est à préciser qu'on ne procède pas au balayage de toute la gamme de champ magnétique pour toutes les mesures. On préfère effectuer des balayages autour des résonances dans une gamme de champs suffisamment étroite pour permettre d'optimiser les conditions expérimentales. En répétant cette procédure pour différentes raies d'émission laser, on obtient la dépendance en champ magnétique des résonances étudiées.

Comme le champ magnétique varie lors des mesures de résonance, on doit tenir compte des effets de la magnétorésistance de l'échantillon sur le spectre obtenu. En plus de rendre difficile la comparaison entre les amplitudes des structures d'un même spectre, la magnétorésistance peut amener

Chapitre 3: Résultats et analyse

certaines asymétries dans les pics de résonance.

Chapitre 3

Résultats et analyse

3.1 Caractérisation de base de l'échantillon

Les mesures de Hall montrent une mobilité électronique de $11\,500\text{ cm}^2/\text{Vs}$ à 300 K et de $50\,000\text{ cm}^2/\text{Vs}$ à 4.2 K . L'échantillon possède ainsi une très bonne mobilité électronique pour ce type de composé. Rappelons à cet effet que la mobilité électronique des composés ternaires est réduite par le désordre d'alliage, phénomène absent des composés binaires.

La figure 12 montre d'une part la variation de la résistance de l'échantillon avec la température et d'autre part, sa variation avec le champ magnétique. À champ magnétique nul, la résistance de

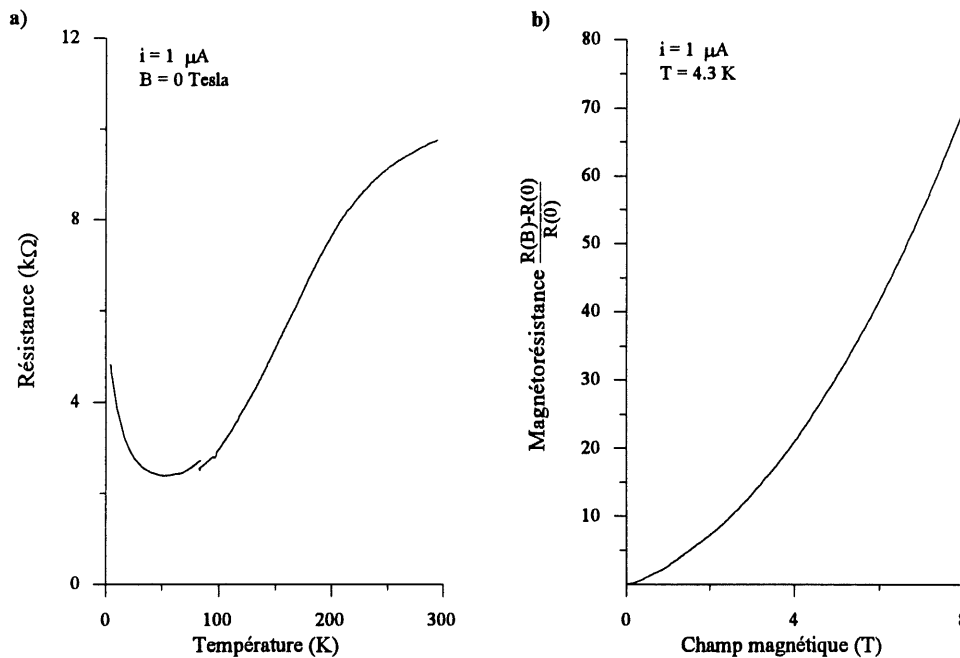


Figure 12 : Variation de la résistance de l'échantillon en fonction a) de la température et b) du champ magnétique.

l'échantillon varie entre $5\text{ k}\Omega$ (à basse température) et $10\text{ k}\Omega$ (à température ambiante) en passant par un minimum de $2.5\text{ k}\Omega$ vers les 50 K . La variation de la résistance en champ magnétique est très importante. Ainsi, à 8 Tesla , la résistance de l'échantillon est 100 fois plus élevée qu'à champ nul.

3.2 Effet de la pression hydrostatique sur les résonances et sur la bande interdite

Dans cette section, nous présentons des résultats qualitatifs concernant l'effet de la pression hydrostatique sur la résonance de spin, la résonance cyclotron et l'énergie de la bande interdite. La figure 13 montre des spectres de photoconductivité de la résonance de spin pris à une même longueur d'onde mais pour différentes valeurs de pression hydrostatique appliquée. On y voit un déplacement vers les forts champs magnétiques de la position de la résonance de spin qui souligne la diminution de la norme du facteur- g effectif. Cette figure montre également que la forme et l'amplitude du signal de photoconductivité sont très différentes d'une mesure à l'autre. On peut attribuer ces différences aux facteurs mentionnés à la section 2.1 ainsi qu'à des changements de distribution et d'intensité de l'éclairement sur l'échantillon, d'un spectre à l'autre.

De façon semblable, la figure 14 montre le signal de photoconductivité de la résonance cyclotron pris à une même longueur d'onde mais pour différentes valeurs de pression. Le déplacement de la position de la résonance vers les champs magnétiques plus élevés indique cette fois une augmentation de la masse effective des porteurs de la bande de conduction. Les considérations précédentes concernant la forme du signal de photoconductivité peuvent également être faites pour la résonance cyclotron. Toutefois, en raison du coefficient d'absorption beaucoup plus élevé de la résonance cyclotron par rapport à la résonance de spin et du plus grand signal de photoconductivité qui en résulte, on observe une meilleure définition et reproductibilité de la forme du signal.

Tenant compte de toutes les réserves que nous avons exprimées face aux limites de la photoconductivité pour l'étude de la forme et de l'amplitude des résonances, nous avons comparé la largeur à mi-hauteur des différentes structures. En moyenne, la résonance cyclotron présente une largeur de 0.4 T alors que pour la résonance de spin, la largeur à mi-hauteur des structures est de 0.3 T . Nous

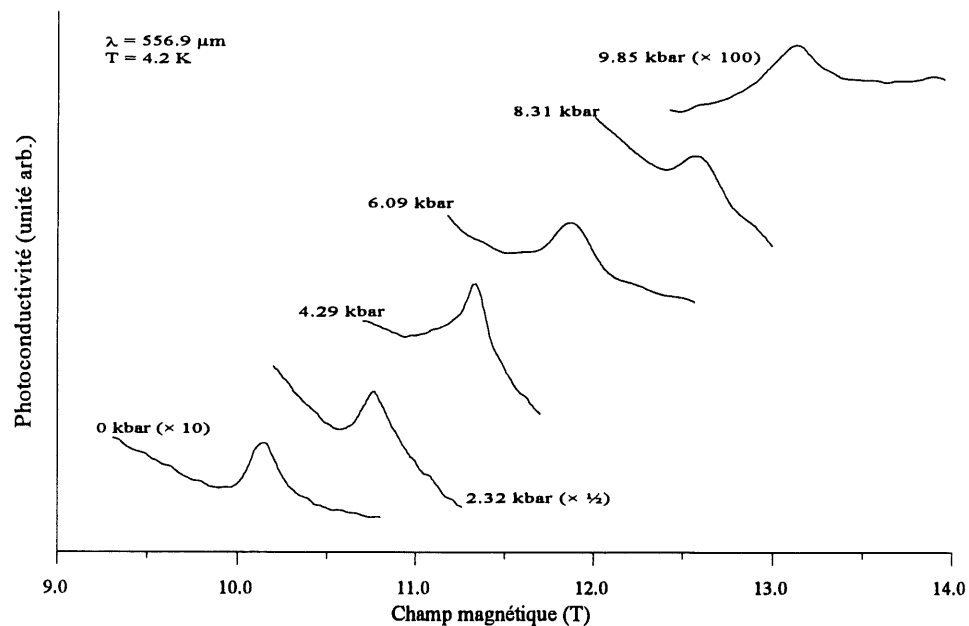


Figure 13 : Signal de photoconductivité de la résonance de spin sous différentes pressions hydrostatiques.

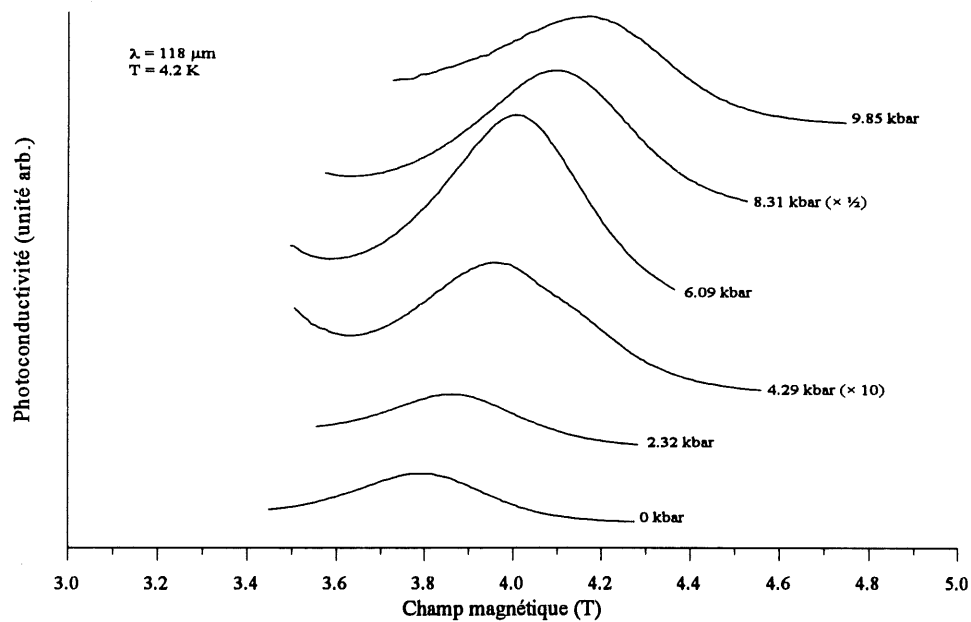


Figure 14 : Signal de photoconductivité de la résonance cyclotron sous différentes pressions hydrostatiques.

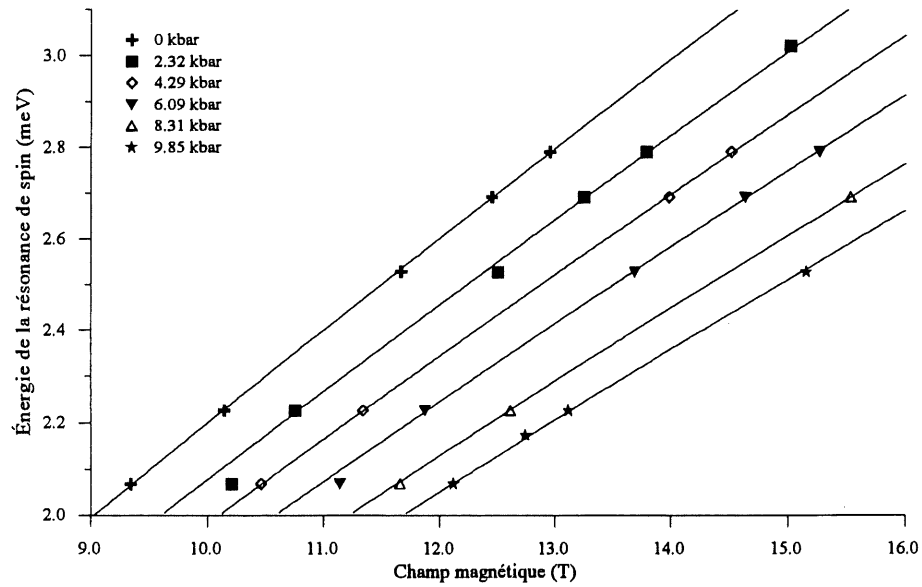


Figure 15 : Énergie et position de la résonance de spin pour différentes longueurs d'onde et pressions. Les trait continus représentent les résultats de la simulation à l'aide du modèle théorique.

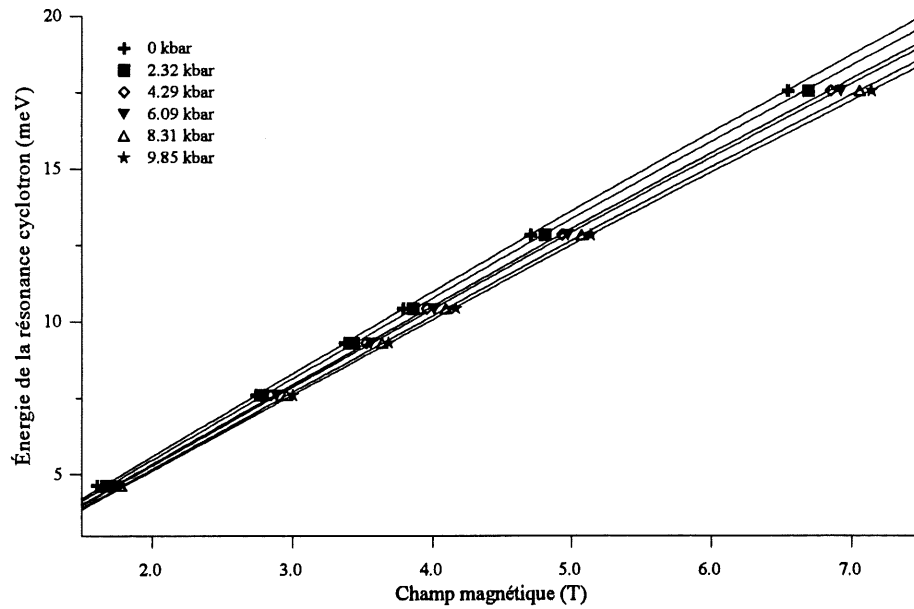


Figure 16 : Énergie et position de la résonance cyclotron pour différentes longueurs d'onde et pressions. Les trait continus représentent les résultats de la simulation à l'aide du modèle théorique.

	InSb (Huant)	In _{0.53} Ga _{0.47} As	Ratio exp.	Ratio théo.
Rés. de spin	0.02 T	0.3 T	15	~ 12
Rés. cyclotron	0.2 T	0.4 T	2	~ 3

Tableau 8 : Comparaison de la largeur des résonances entre l'In_{0.53}Ga_{0.47}As et l'InSb. Les valeurs pour l'InSb sont tirées de [37] .

avons tenté de comparer ces valeurs à celles obtenues par Huant *et al.* [37] dans l'InSb où la résonance de spin était beaucoup plus fine, soit d'environ 0.02 T. Pour ce faire, on peut montrer que la largeur à mi-hauteur d'une résonance¹¹ (Γ) est reliée au temps de vie de l'état excité (τ) et au coefficient d'absorption (α) de la façon suivante [38] :

$$\Gamma \propto \frac{1}{\tau} \propto \alpha (\nu = \nu_R) \quad (3.37)$$

où $\nu = \nu_R$ est la condition de résonance. Sachant que $\alpha_{RS} (\nu = \nu_{RS}) \propto \frac{1}{g^*}$ dans le cas de la résonance de spin et que $\alpha_{RC} (\nu = \nu_{RC}) \propto m^*$ dans le cas de la résonance cyclotron, on utilise l'équation précédente pour déduire que le ratio des largeurs à mi-hauteur entre l'In_{0.53}Ga_{0.47}As et l'InSb vaut

$$\frac{\Gamma_{RS}^{InGaAs}}{\Gamma_{RS}^{InSb}} = \frac{g_{InSb}^*}{g_{InGaAs}^*} \sim \frac{-51.3}{-4.1} \sim 12.5, \quad (3.38)$$

dans le cas de la résonance de spin et

$$\frac{\Gamma_{RC}^{InGaAs}}{\Gamma_{RC}^{InSb}} = \frac{m_{InGaAs}^*}{m_{InSb}^*} \sim \frac{0.041}{0.014} \sim 3, \quad (3.39)$$

pour la résonance cyclotron.

Ces ratio correspondent bien aux résultats expérimentaux comme en fait foi le tableau 8.

En rapportant l'énergie de résonance en fonction du champ magnétique de résonance pour les différentes raies laser utilisées et pour les pressions hydrostatiques étudiées, on obtient la figure 15 pour la résonance de spin et la figure 16 pour la résonance cyclotron. Ce sont ces données auxquelles nous ajustons le modèle théorique pour obtenir les valeurs des paramètres de la structure de bande.

¹¹ Pour cette analyse, nous n'avons pas tenu compte de l'élargissement des résonances causé par l'inhomogénéité de l'échantillon.

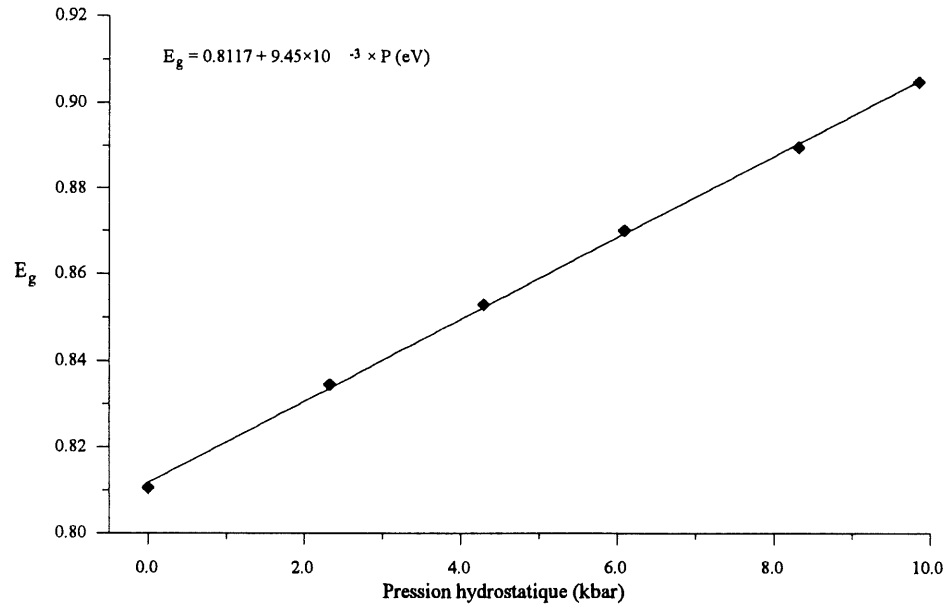


Figure 17 : Variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la pression.

Finalement, nous présentons à la figure 17 l'augmentation de la bande interdite avec la pression hydrostatique appliquée. Ces données sont tirées des mesures de transitions interbandes à champ nul et corrigées pour l'énergie de liaison de l'exciton (annexe I). La valeur de E_g sera introduite dans le modèle lors de l'analyse des données de la résonance de spin et de la résonance cyclotron.

3.3 Résonance de spin des états d'impuretés

Nous avons vu dans la section 1.5 b) qu'en plus de la résonance de spin dans la bande de conduction, il est possible dans certains cas d'observer la résonance sur les états d'impuretés. Nos expériences n'ont toutefois permis de mettre en évidence qu'une seule structure de résonance dans le signal de photoconductivité, que nous associons à la résonance de spin des électrons de conduction pour la raison donnée ci-après.

Rappelons que la technique de photoconductivité ne permet de mesurer que les mécanismes d'absorption qui modifient les processus de conduction. Dans notre cas, à cause de la position des niveaux d'impuretés par rapport à la bande de conduction, il est très peu probable que la RSI permette

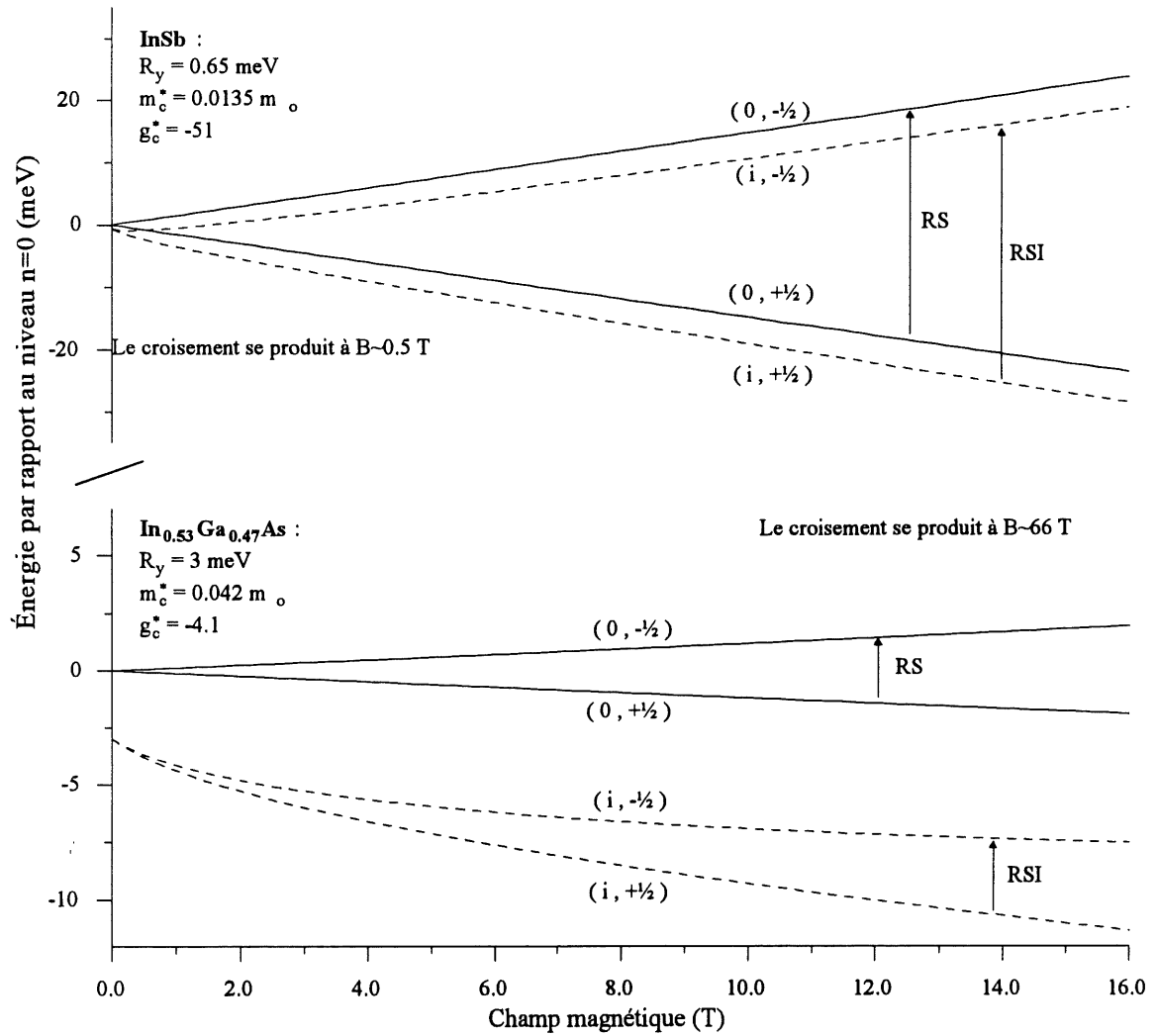


Figure 18 : Comparaison entre la résonance de spin dans l'InSb et dans l'In_{0.53}Ga_{0.47}As. Dans le cas de l'InSb, l'inversion des niveaux $(i, -\frac{1}{2})$ et $(0, +\frac{1}{2})$ permet à la résonance de spin sur les états d'impuretés de contribuer aux processus de conduction et donc d'être observée par photoconductivité.

à des électrons de contribuer à la conduction. La figure 18 fait la comparaison entre l'InSb, où la RSI a été observée par absorption et par photoconductivité, et l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$. On y constate qu'à très bas champ magnétique dans l'InSb, le niveau $+\frac{1}{2}$ de la bande de conduction passe sous le niveau d'impureté $-\frac{1}{2}$. Il est clair que dans ce cas, la RSI, qui amène les électrons du niveau $(i, +\frac{1}{2})$ vers le niveau $(i, -\frac{1}{2})$, peut facilement contribuer à la conduction puisque les électrons excités peuvent se relaxer dans le niveau de la bande de conduction $(0, +\frac{1}{2})$. Un tel mécanisme n'existe pas dans le cas de l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ parce que le niveau $(0, +\frac{1}{2})$ reste au-dessus du niveau $(i, -\frac{1}{2})$ jusqu'à un champ magnétique d'environ 66 T. Ainsi dans notre cas, bien que la RSI pourrait être observée par des mesures d'absorption, nous croyons que seule la RS peut être observée par la mesure de la photoconductivité de l'échantillon.

3.4 Comparaison entre la théorie $\vec{k} \cdot \vec{p}$ et l'expérience

Cette dernière étape avant de procéder à la présentation et à l'analyse des résultats obtenus vise à décrire la méthode utilisée pour déduire les paramètres de la structure de bande à partir des résultats expérimentaux. Elle consiste essentiellement à fixer les paramètres du modèle, à calculer l'énergie des transitions et à les comparer aux énergies observées expérimentalement. On reprend l'opération en modifiant les paramètres jusqu'à l'obtention d'un accord satisfaisant entre le modèle et l'expérience.

On utilise un programme effectuant le calcul numérique des niveaux d'énergie à partir du modèle décrit dans la section 1.3. La première tâche du programme consiste à construire, à partir des paramètres choisis et des équations du tableau 3, les matrices H_a et H_b ¹². Celles-ci sont ensuite transmises à la procédure de diagonalisation [39] qui se charge de calculer les valeurs propres des matrices. On obtient ainsi huit valeurs propres correspondant, en ordre décroissant d'énergie, aux deux états de spin de la bande de conduction, de la bande de trous lourds, de la bande de trous légers et de la bande spin-orbite. C'est à partir de ces valeurs propres que l'on obtient l'énergie des transitions étudiées.

¹² Rappelons que l'hamiltonien simplifié est formé de deux matrices 4×4 , série *a* et série *b*, associées aux configurations du spin électronique.

Dans le cas de la résonance cyclotron dans la bande de conduction, nous nous intéressons à la différence d'énergie entre les niveaux de Landau $n = 0$ et $n = 1$ d'une même série (a ou b). Il est à noter que l'énergie de la résonance cyclotron de la série a diffère de celle de la série b par environ 1 %. Un si faible écart d'énergie est expérimentalement indiscernable compte tenu de la largeur des pics. Par conséquent, nous utilisons la moyenne de l'énergie de transition calculée pour les deux cas. À cette énergie de résonance, il faut ajouter la contribution de l'effet magnéto-polaron résonant (annexe II). Dans le cas de la résonance de spin, nous nous intéressons à la différence d'énergie entre le niveau $n = 0$ de la série a et le niveau $n = 0$ de la série b . Aucune correction ne lui est apportée par la suite.

La procédure calcule finalement l'écart quadratique moyen entre les énergies de transition calculées et les résultats expérimentaux afin de permettre une comparaison quantitative. Cet indicateur d'écart facilite grandement la recherche de la combinaison de paramètres qui permet d'ajuster de manière optimale la théorie à l'expérience.

Afin de mieux visualiser la non-parabolicité des bandes, il est pratique de représenter graphiquement, non pas les énergies de transition, mais plutôt l'écart entre ces dernières et les énergies correspondantes que nous aurions obtenues dans un système de bandes paraboliques. Pour illustrer cette idée, prenons le cas de la résonance cyclotron. Dans un système de bandes paraboliques, la masse effective est constante en fonction de l'énergie des électrons dans la bande et prend la valeur donnée à l'équation 1.17. La dépendance en champ magnétique de la résonance cyclotron pour ce système est donc linéaire, comme le montre la figure 19 a), alors que les résultats expérimentaux montrent un comportement nettement non linéaire. La figure 19 b) montre l'écart entre les deux courbes précédentes. Cette représentation, sorte de vue agrandie de la non-parabolicité des bandes, permet de mieux visualiser l'accord théorie-expérience.

3.5 Comportement en pression des paramètres de bande

En suivant la procédure décrite dans la section précédente pour simuler les mesures expérimentales, on cherche à obtenir les paramètres de la structure de bande pour chaque valeur de pression hydrostatique appliquée.

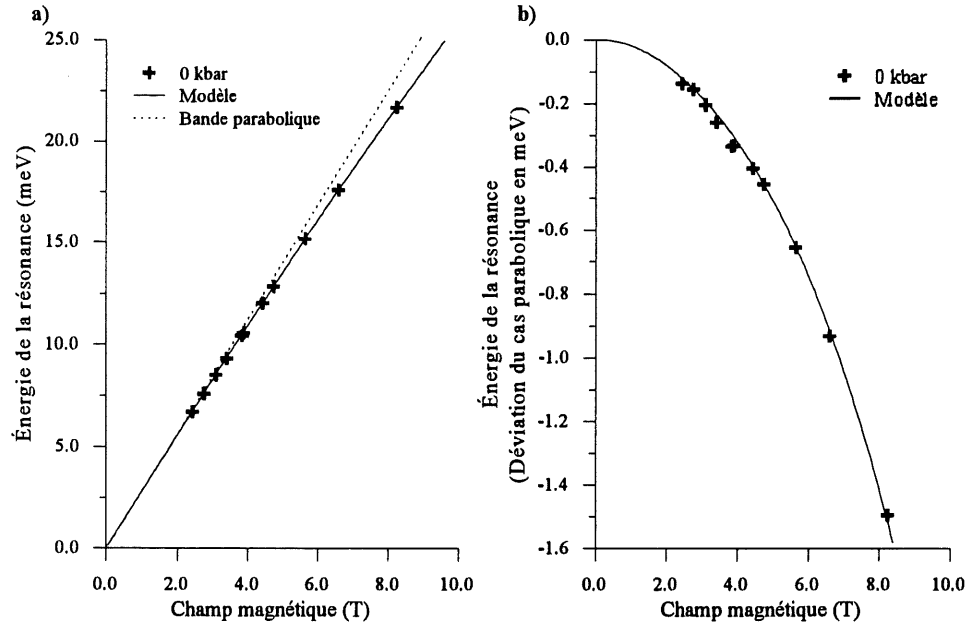


Figure 19 : Écart à un système de bandes paraboliques. a) Comparaison de l'énergie de la résonance cyclotron entre les points expérimentaux et un système de bandes paraboliques de même masse effective à $\vec{B} = 0$. b) Écart entre les deux courbes du graphique a)

La première approche retenue consiste à simuler les mesures de résonance de spin en n'utilisant que les paramètres de la bande de conduction, à savoir E_p , F et N_1 , comme paramètres ajustables. Les autres paramètres du modèle, à savoir ceux des bandes de valence, sont tirés des travaux de Alavi *et al.* [3] (voir tableau 10) et sont considérés comme invariants sous pression. Nous reviendrons sur cette approximation plus loin. Quant à la valeur de la bande interdite (E_g), elle est déduite de la régression linéaire des mesures interbandes (figure 17).

Cette première approche ne permet pas de déterminer sans ambiguïté les paramètres ajustables. En effet, plusieurs combinaisons différentes de paramètres permettent d'ajuster le modèle théorique aux mesures de résonance de spin avec une fidélité comparable. Cela est dû à la marge d'erreur expérimentale, ainsi qu'à la faible gamme d'énergie sur laquelle la résonance de spin a pu être observée.

Face à ce constat, la seconde approche retenue consiste à ajuster le modèle aux mesures de résonance de spin et, simultanément, aux mesures de résonance cyclotron¹³. On introduit ainsi une contrainte

¹³ Incluant la correction pour l'effet magnéto-polaron résonant.

E_g	$0.8117 + 9.45 \times 10^{-3} \cdot P$	± 0.0005	(eV)
m_c^*	$0.0410 + 4.0 \times 10^{-4} \cdot P$	± 0.0002	(m_e)
g_c^*	$-4.089 + 0.102 \cdot P - 1.2 \times 10^{-3} \cdot P^2$	± 0.01	
E_p	$24.13 + 0.069 \cdot P$	± 0.04	(eV)
F	$-1.64 - 0.014 \cdot P$	± 0.03	
N_1	0	± 0.05	

Tableau 9 : Variation des paramètres de la bande de conduction en fonction de la pression hydrostatique appliquée

Δ	0.36	(eV)
γ_1	0.62	
γ'	-1.02	
γ''	-0.69	
κ	-1.91	
q	0	

Tableau 10 : Paramètres des bandes de valence tirés de Alavi *et al.* [3]

supplémentaire dans l'analyse des données expérimentales. Nous avons constaté que cette approche nous permet de déterminer sans ambiguïté la combinaison des paramètres qui donne un accord optimal avec les résultats expérimentaux.

Le tableau 9 montre la variation obtenue des différents paramètres de la bande de conduction en fonction de la pression hydrostatique appliquée. Ces équations expriment la variation phénoménologique des paramètres et non des solutions analytiques au modèle théorique utilisé. On retrouve également ces résultats dans les figures 20, 21, 22 et 23. Les marges d'erreur indiquées tiennent compte de la gamme sur laquelle les paramètres peuvent être variés sans modifier la qualité de l'accord théorie-expérience. Les droites des figures 20 et 22 sont obtenues par régression linéaire des valeurs des paramètres en fonction de P . Dans le cas du facteur- g effectif, il est nécessaire d'introduire un terme quadratique en P pour décrire adéquatement la variation de g_c^* en pression. En raison de la marge d'erreur très grande sur la valeur du paramètre F , nous avons utilisé l'équation 1.17 pour déduire la variation phénoménologique de F en pression.

3.5 a) Comparaison avec certains résultats antérieurs

Il est intéressant de comparer les résultats obtenus par nos mesures aux valeurs des paramètres déjà

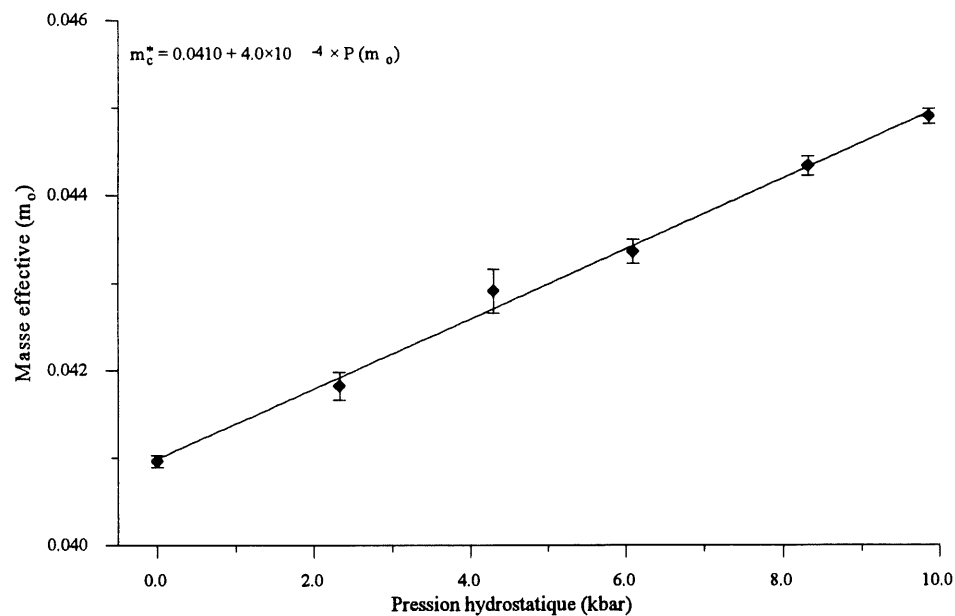


Figure 20 : Variation de la masse effective m_c^* en fonction de la pression hydrostatique appliquée.

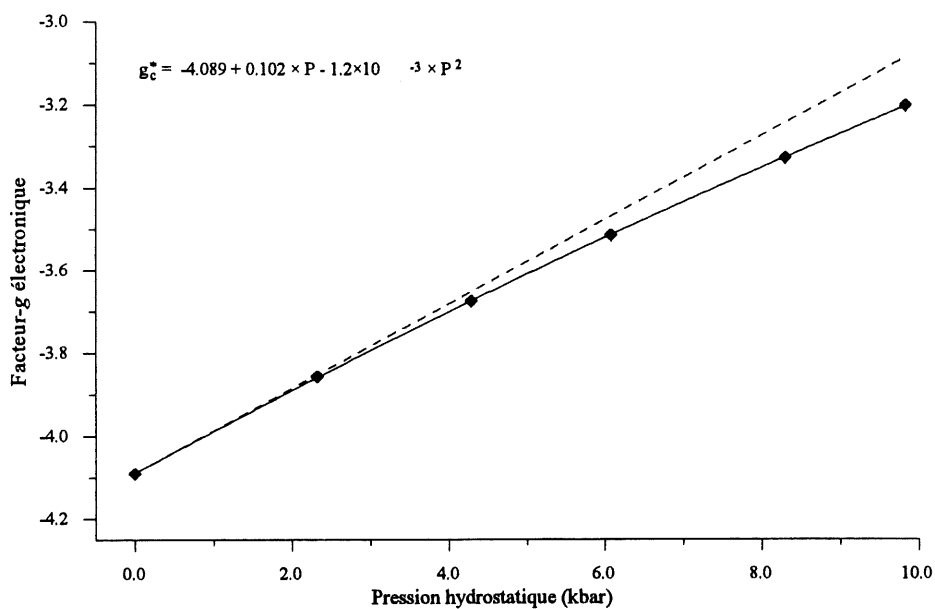


Figure 21 : Variation du facteur- g effectif g_c^* en fonction de la pression hydrostatique appliquée. La droite pointillée est tangente à la courbe continue en $P = 0$.

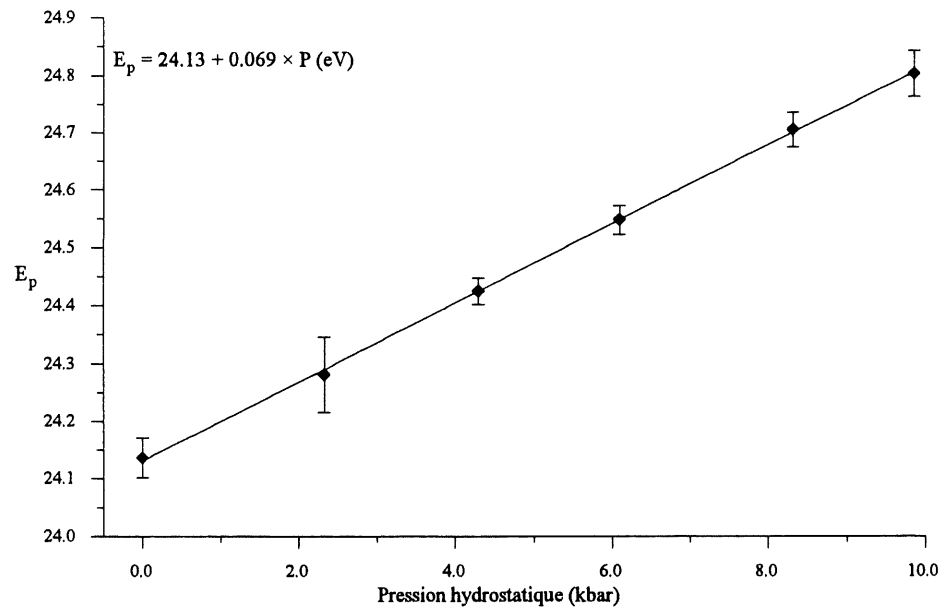


Figure 22 : Variation de E_p en fonction de la pression hydrostatique appliquée.

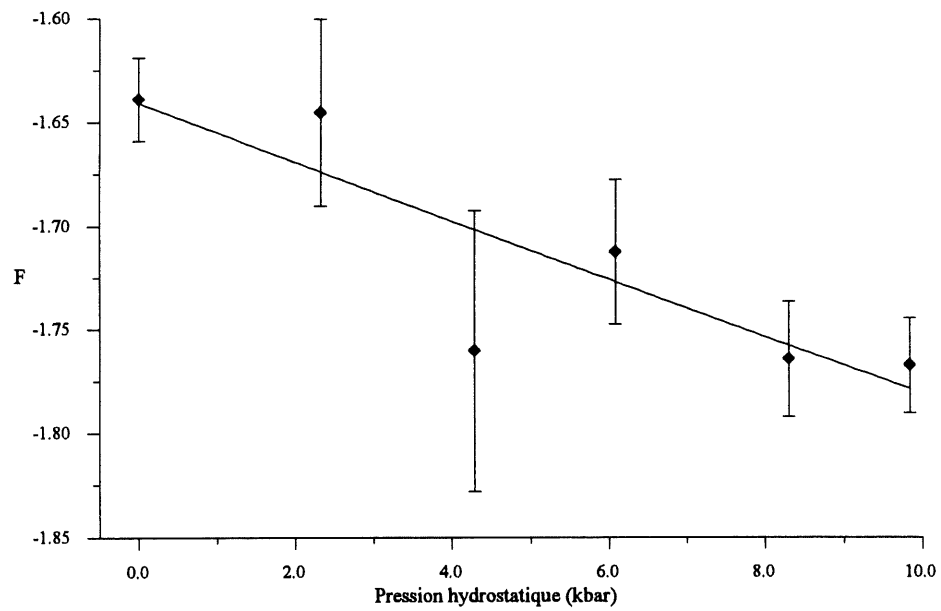


Figure 23 : Variation de F en fonction de la pression hydrostatique appliquée.

Lasserre [5]	E_g	$= 0.809 + 9.5 \times 10^{-3} \cdot P$	meV
Adachi [40]	dE_g/dP	$= 10.3$	$meV/kbar$
Lasserre [5]	m_c^*	$= 0.0405 + 4.29 \times 10^{-4} \cdot P$	m_e
Pelenc [6]	m_c^*	$= 0.0413 + 3.7 \times 10^{-4} \cdot P$	m_e
Alavi <i>et al.</i> [3]	m_c^*	$= 0.041 \pm 0.003$	m_e

Tableau 11 : Valeurs déjà publiés des paramètres de la structure de bande pour fin de comparaison avec nos résultats. P est exprimé en $kbar$.

publiées (tableau 11). Les variations observées de E_g et de m_c^* en fonction de la pression sont en accord avec les résultats de Lasserre [5] et de Pelenc [6], obtenus sur des échantillons provenant du même substrat. La variation de E_g correspond également aux valeurs rapportées par Adachi. [40]

Il en va de même pour la variation de la masse effective en fonction de la pression obtenue par Lasserre à partir de mesures interbandes mais aussi par les mesures de résonance cyclotron faites par Pelenc [6]. La valeur de m_c^* à pression ambiante correspond également aux valeurs obtenues par différentes méthodes par Alavi *et al.*, Nicholas *et al.* [41] et Hermann et Weisbuch.

Le facteur- g que nous avons obtenu se situe dans la gamme des valeurs actuellement acceptées dans l' $In_{0.53}Ga_{0.47}As$. Celle-ci va de -3.38 , obtenue par des mesures d'électroréflectance [42], à -4.5 obtenue par des mesures de magnétoabsorption interbande [3]. Une valeur de -4.1 pour le facteur- g de l' $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ massif a également été obtenue par l'analyse de la résonance de spin dans des hétérostructures à gaz électronique bidimensionnel [43]. Une valeur de -4.01 ± 0.04 a été tirée de mesures sur des gaz électroniques quasi-tridimensionnels [44].

Quant aux valeurs obtenues pour le paramètre E_p , elles se retrouvent non loin des résultats de Alavi *et al.* ($25.3 eV$) à l'intérieur de la gamme de validité qu'il a estimé entre 20.5 et $27.9 eV$. Nos valeurs de E_p sont toutefois plus élevées que celles obtenues par Lasserre [5] et Pelenc [6] à cause du modèle que nous avons utilisé qui fait intervenir un autre paramètre, F , représentant la contribution des bandes supérieures.

3.5 b) Le comportement attendu des paramètres sous l'effet de la pression

Pour analyser des résultats expérimentaux, nous procéderons en deux temps : nous utiliserons

d'abord une analogie très simple pour déduire le comportement attendu en pression des paramètres du modèle, puis nous étudierons plus en détail les déformations de la structure de bande produites par la pression.

L'application d'une pression hydrostatique cause une réduction du paramètre de maille du cristal étudié. Or, nous savons que l'on peut également réduire le paramètre de maille du cristal semi-conducteur en modifiant sa composition. Plus précisément, dans le cas de l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, le paramètre de maille diminue à mesure que la concentration en Ga augmente. On constate ainsi l'analogie entre, d'une part, l'effet de la pression sur un échantillon de composition donnée et, d'autre part, l'effet de l'augmentation du contenu en gallium de l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ à pression ambiante. On peut étendre cette analogie simple aux paramètres de bande de l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, tels que E_g , m_c^* , g_c^* et E_p , pour constater que l'effet de l'application d'une pression hydrostatique peut se comparer à une augmentation du contenu en gallium d'un échantillon maintenu à pression ambiante. Ces variations en fonction de la pression et de la composition sont consignées aux tableaux 12 et 13. On y trouve les valeurs des paramètres de bande pour l'InAs et le GaAs et les résultats obtenus à pression ambiante et à 9.85 kbar pour notre échantillon d' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$.

Nous pouvons aller plus loin et tirer des données quantitatives de cette analogie. On constate d'abord que le paramètre de maille varie de 6.058 Å (InAs) à 5.653 Å (GaAs) à raison de -4.1×10^{-3} Å par point de pourcentage de la concentration de gallium. On note également que l'application d'une pression hydrostatique de 9.85 kbar sur l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ réduit sa maille de 0.029 Å, soit une variation de -2.9×10^{-3} Å par kbar. En utilisant l'analogie composition/pression, on en déduit que l'application d'une pression hydrostatique de 1 kbar a un effet comparable à l'augmentation de la concentration en gallium de 0.72 point de pourcentage à pression ambiante. En appliquant cette logique aux valeurs obtenues pour E_g , m_c^* , g_c^* , E_p et F , on constate que, dans la gamme de pression utilisée, les paramètres de la bande de conduction ont un comportement en pression semblable correspondant à environ 0.96 % Ga/kbar (tableau 13). On peut ainsi comprendre l'ordre de grandeur de la variation des paramètres sous pression. Par exemple, l'application d'une pression de 10 kbar devrait, selon ce raisonnement, correspondre à une augmentation de 9.6 points de pourcentage du contenu en Ga. Or, le gap de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ varie de 0.42 eV à 1.519 eV dans toute la gamme de composition, soit 11 meV par point de pourcentage de gallium. On en conclut une variation attendue de

		InAs	GaAs	Variation par % de concentration en Ga	
E_g	(eV)	0.420	1.519	1.1×10^{-2}	(eV/% Ga)
m_c^*	(m_o)	0.0230	0.0667	4.37×10^{-4}	(m_o /% Ga)
g_c^*		-14.00	-0.44	1.36×10^{-1}	(s.d./% Ga)
E_p	(eV)	22.20	28.90	6.7×10^{-2}	(eV/% Ga)
F		-1.02	-1.97	-9.5×10^{-3}	(s.d./% Ga)
a	(Å)	6.058	5.653	-4.1×10^{-3}	(Å/% Ga)
Δ	(eV)	0.380	0.341	-3.9×10^{-4}	(eV/% Ga)
E'	(eV)	4.020	2.969	-1.05×10^{-2}	(eV/% Ga)
Δ'	(eV)	0.16	0.17	1×10^{-4}	(eV/% Ga)
E'_p	(eV)	0.20	6.00	5.8×10^{-2}	(eV/% Ga)

Tableau 12 : Variation des paramètres entre fonction de la composition en Ga. Les valeurs pour l'InAs et le GaAs sont tirées de [9] à l'exception de a qui provient de [45] et de F qui est calculé à partir des autres paramètres (eq. 1.17). La variation des paramètres par points de pourcentage en concentration de Ga présume une variation linéaire des paramètres entre l'InAs et le GaAs.

		In _{0.53} Ga _{0.47} As 0 kbar	In _{0.53} Ga _{0.47} As 9.85 kbar	Variation par kbar		% Ga/kbar
D'après nos mesures						
E_g	(eV)	0.8117	0.9062	9.59×10^{-3}	(eV/kbar)	0.87
m_c^*	(m_o)	0.0410	0.0450	4.06×10^{-4}	(m_o /kbar)	0.93
g_c^*		-4.089	-3.189	9.14×10^{-2}	(s.d./kbar)	0.67
E_p	(eV)	24.13	24.82	7×10^{-2}	(eV/kbar)	1.04
F		-1.64	-1.78	-1.4×10^{-2}	(s.d./kbar)	1.47
Estimé						
a	(Å)	5.870	5.841	-2.9×10^{-3}	(Å/kbar)	0.72

Tableau 13 : Variation des paramètres entre fonction de la pression telle qu'obtenue par nos mesures. Les valeurs de a ont été estimées à partir des constantes élastiques du matériau [46]. Dans le cadre de l'analogie pression/composition, la dernière colonne établit la correspondance en % de composition en Ga de l'effet d'une pression hydrostatique de 1 kbar.

10.6 meV/kbar, alors que nous observons 9.6 meV/kbar.

3.5 c) La déformation de la structure de bande sous l'effet de la pression

Nous nous intéressons maintenant à la déformation de la structure de bande autour du point Γ sous l'effet de la pression que l'on peut analyser par les variations des paramètres de bande. Conformément à la section 1.6, nous constatons que la bande de conduction s'éloigne des bandes de valence à mesure que la pression augmente. En même temps, l'accroissement de E_p indique, par sa définition (équ. 1.12), que le couplage entre la bande de conduction et la bande de valence augmente avec la pression. Cela s'explique aisément en se rappelant que le paramètre de maille du cristal diminue avec P , augmentant ainsi le recouvrement des fonctions d'onde électroniques.

À partir de la définition de la masse effective (équ. 1.17), on voit que l'effet de l'augmentation de E_g sur m_c^* est partiellement compensé par l'accroissement du paramètre E_p . Il en va de même pour g_c^* (voir équ. 1.18). Sans l'augmentation de E_p en fonction de la pression, la masse effective à 9.85 kbar aurait été 3 % supérieure et son taux de variation 36 % supérieure au taux déduit de nos mesures. Le facteur- g effectif à 9.85 kbar aurait été 5 % inférieur et son taux de variation 15 % supérieure au taux obtenu ici. Nous avons ainsi fait la preuve que le paramètre E_p n'est pas indépendant de la pression. Cette conclusion, opposée à celle de Lasserre [5] et Pelenc [6], s'explique par l'obtention d'une plus grande précision sur les valeurs des paramètres que les mesures de résonance de spin ont permis.

Dans le tableau 14, nous avons calculé la valeur de F et sa variation en pression à partir de l'équation 1.19¹⁴. Bien que ces valeurs estimées de F soient inférieures à nos résultats, on constate que la correspondance composition/pression est du même ordre de grandeur que notre observation (tableau 13). Si E_p' était constant, la variation de E' nécessaire pour obtenir la bonne variation de F aurait dû être dix fois supérieure, ce qui est fort peu probable. Cette observation nous permet de conclure que l'augmentation de la norme du paramètre F met en évidence, à la fois l'accroissement du couplage (E_p') entre la bande de conduction et les bandes Γ_7 et Γ_8 supérieures, et la diminu-

¹⁴ La valeur de K est tirée de la référence [9] et considérée constante. On peut également se référer aux remarques en page 17 concernant la contribution relative de K à F .

		In _{0.53} Ga _{0.47} As 0 kbar	In _{0.53} Ga _{0.47} As 9.85 kbar	% Ga/kbar
Δ	(eV)	0.359	0.355	0.96
E'	(eV)	3.463	3.364	0.96
Δ'	(eV)	0.165	0.166	0.96
E'_p	(eV)	3.27	3.82	0.96
F		-1.46	-1.55	0.98
N_1		-0.010	-0.028	0.98

Tableau 14 : Estimation de F et de N_1 à partir des paramètres des bandes supérieures (éq. 1.19 et 1.20). La valeur des paramètres Δ , E' , Δ' et E'_p à 0kbar sont estimés par interpolation entre leurs valeurs dans l'InAs et le GaAs figurant au tableau 12. La valeur de ces paramètres à 9.85kbar est calculée à partir d'une correspondance concentration/pression moyenne de 0.96 % Ga/kbar. On peut montrer que la variation simultanée de E' et de E'_p en pression est essentielle pour expliquer la variation observée de F .

tion de l'écart en énergie entre ces bandes (E'). Ce dernier effet de la pression, d'origine similaire à l'augmentation de E_g , est décrit dans la section 1.6. Quant à l'augmentation de E'_p , comme dans le cas de E_p , elle trouve son origine dans l'augmentation du recouvrement des fonctions d'onde électroniques causée par la diminution de la maille du cristal sous l'effet de la pression.

Un problème est apparu pour la détermination de la valeur de N_1 . En effet, comme dans le cas de l'étude faite par Beerens *et al.* [4], la procédure d'ajustement théorie-expérience donne un accord optimal lorsque N_1 prend des valeurs positives et faibles, inférieures à 0.02, et ce pour toutes les valeurs de pression étudiées. Or, la théorie nous indique que la valeur de N_1 devrait être faible (voir tableau 14) et négative (voir page 17). Pour éliminer cette incohérence, nous avons convenu de fixer à zéro la valeur de N_1 . Nous croyons cette solution justifiée par la vérification du fait que des variations de l'ordre de 0.05 de la valeur de N_1 ne réduisent pas de façon significative la qualité de l'accord théorie-expérience, compte tenu de l'erreur sur la mesure expérimentale. Le tableau 14 permet de confirmer cette solution en montrant que la variation estimée de N_1 avec la pression est bien inférieure à la précision que nous pouvons atteindre et dont nous venons de faire mention. De ce fait, nous n'avons pas réussi à augmenter la précision de la valeur de N_1 et aucune variation de N_1 avec la pression n'a pu être observée.

Finalement, nous avons mentionné que les paramètres des bandes de valence ont été considérés invariants sous pression. Pour confirmer cette approximation, nous avons vérifié que des variations de 25 % de la valeur des paramètres des bandes de valence n'influencent que très peu la qualité de

Conclusion

l'accord théorie-expérience en regard de la résonance de spin et la résonance cyclotron. De plus, cette vérification permet de justifier l'utilisation des seules mesures de résonance cyclotron et de résonance de spin pour la détermination des paramètres de la bande de conduction, les paramètres des bandes de valence n'influençant que très peu le détail des effets non-paraboliques de la bande de conduction dans la gamme d'énergie considérée.

Ajoutons pour terminer qu'à partir des paramètres mesurés de la bande de conduction et des paramètres de Alavi *et al.* pour les bandes de valence, nous avons tenté sans succès de simuler les mesures de transitions interbandes. Rappelons que les paramètres de Alavi *et al.* ont été obtenus par des mesures de transitions interbandes. Cette technique se révèle beaucoup moins précise que les mesures de résonance cyclotron et de résonance de spin pour l'étude de la bande de conduction à $\vec{k} = 0$. Ainsi, il semble que les valeurs des paramètres publiées par Alavi *et al.* devraient être révisées à la suite d'une étude plus approfondie des transitions interbandes en tenant compte des valeurs des paramètres de la bande de conduction que nous avons obtenus. Il est également possible qu'une telle étude remette en question la validité du modèle théorique dans la gamme d'énergie de l'ordre de l'énergie de la bande interdite.

Conclusion

Nous avons mesuré la résonance de spin des électrons de conduction dans l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ par une technique de photoconductivité dans l'infrarouge lointain tout en soumettant l'échantillon à différentes pressions hydrostatiques allant jusqu'à 9.85 kbar . Dans les mêmes conditions de pression hydrostatique et par photoconductivité, nous avons également utilisé une technique de photoconductivité pour mesurer la résonance cyclotron et le spectre de transitions interbande. L'ajustement d'un modèle théorique de formalisme $\vec{k} \cdot \vec{p}$ aux mesures expérimentales nous a permis d'obtenir la valeur des paramètres de la bande de conduction, à savoir E_g , E_p , F et N_1 , ainsi que leur variation en pression. Ces paramètres nous permettent de calculer la masse effective (m_c^*) et le facteur-g effectif (g_c^*) des électrons de conduction en $\vec{k} = 0$ et à champ magnétique nul pour la gamme de pressions hydrostatiques allant jusqu'à 9.85 kbar . Nous avons également montré que l'effet de la pression hydrostatique sur la structure de bande est analogue au changement de la composition de l'alliage semiconducteur. Ce constat pourrait être utilisé lors de la conception et de l'optimisation de dispositifs formés d'hétérostructures à couches contraintes.

Rappelons que ce modèle tient compte explicitement de la bande de conduction Γ_6 et des trois bandes de valence Γ_7 et Γ_8 , les autres bandes étant incluses comme perturbations. Nous avons d'autre part tenu compte de l'énergie de liaison de l'exciton dans l'analyse du spectre interbande et de l'effet magnéto-polaron résonant comme correction aux mesures de résonance cyclotron.

Les valeurs des paramètres obtenus permettent de compléter avec une bonne précision notre connaissance de la bande de conduction de l' $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$. Ceci devrait constituer un très bon point de départ pour l'analyse plus complexe du spectre de photoconductivité interbande de ce matériau.

Annexe I

Correction excitonique aux transitions interbandes

La nécessité de la correction excitonique

L'énergie des transitions interbandes doit être corrigée pour tenir compte de l'énergie de liaison des paires électron-trou (dites "excitons"). En incluant l'interaction coulombienne entre un électron de la bande de conduction et un trou de la bande de valence dans le calcul de la structure de bande, Elliott et Loudon [47] ont démontré l'importance de cette correction sur le coefficient d'absorption interbande. En effet, ne considérant que le premier niveau d'énergie de la paire électron-trou, un maximum d'absorption apparaît sous la bande interdite à une énergie correspondant à l'énergie de liaison de l'exciton. Cependant, plus aucune structure ne permet d'identifier le bord de la bande de conduction. Le comportement en champ magnétique est également fort différent. Ainsi, alors que l'absorption au bord de la bande de conduction est une fonction sous-linéaire en B , le coefficient d'absorption du maximum excitonique est une fonction de puissance de B d'exposant supérieur à 1. On en déduit la dominance de la structure excitonique sur le profil d'absorption de la bande de conduction. Ce constat s'applique également à tous les niveaux de Landau. C'est donc dire que les mesures d'absorption interbande ne mettent en évidence que les excitons associés aux différents niveaux d'énergie et qu'il faut, par conséquent, ajouter au modèle théorique l'énergie de liaison des excitons pour obtenir une comparaison adéquate avec les mesures.

L'exciton : un système hydrogénoïde

Pour décrire le comportement en champ magnétique de l'exciton, de nombreux auteurs ont étudié un système similaire, soit l'atome d'hydrogène sous champ magnétique. L'étude du comportement

des excitons en champ magnétique nous amène à définir deux régimes de champ caractérisés par la compétition entre les niveaux d'énergie du système hydrogénoïde et les niveaux de Landau de l'électron dans la bande. Cette concurrence s'exprime par le biais du champ magnétique normalisé γ , soit le rapport entre l'énergie du niveau de Landau $n=0$ (en fonction de B) et l'énergie du premier niveau du système hydrogénoïde (à champ nul) :

$$\gamma = \frac{\hbar e B}{2m^* R_y^*}. \quad (3.40)$$

On utilisera la masse effective de l'électron (m^*) et le Rydberg effectif (R_y^*) du système hydrogénoïde pour tenir compte de l'application aux semiconducteurs¹⁵. À l'aide de ce paramètre, on définit le premier domaine $\gamma < 1$, de faible champ magnétique, où le caractère hydrogénoïde domine sur les niveaux de Landau. Le second domaine, de fort champ magnétique, lorsque $\gamma > 1$ est caractérisé par la dominance des niveaux de Landau sur les niveaux hydrogénoïdes.

On identifie de ce fait deux comportements de l'énergie de l'exciton. Lorsque $\gamma < 1$, la déformation de la fonction d'onde de l'exciton par le champ magnétique n'est pas suffisante pour modifier de façon significative son énergie. On s'attend donc à observer la structure de l'atome d'hydrogène avec de faibles variations en champ. D'autre part, lorsque $\gamma > 1$, le caractère hydrogénoïde sera caché par les niveaux de Landau. L'énergie de l'exciton devrait donc dépendre principalement de γ , de la même manière que les niveaux de Landau.

Pour effectuer la correction excitonique des transitions interbandes, il est toutefois plus pratique d'utiliser la notion "d'énergie de liaison" qui peut être définie comme étant la différence entre l'énergie interbande de la transition considérée et l'énergie de l'exciton associé à celle-ci :

$$E_l^{ex} = E^{int} - E^{ex}, \quad (3.41)$$

$$E_l^{ex} = \sqrt{\frac{\alpha}{(2n+1)}\gamma + \frac{1}{(n+1)^4}}. \quad (3.42)$$

¹⁵ Notez que cela revient à utiliser le Rydberg effectif comme unité d'énergie. Cette convention sera appliquée tout au long du texte.

Annexe II: Correction polaronique

où $\alpha \sim 1.4$ est une constante phénoménologique dont la valeur est déterminée en ajustant le modèle à des calculs théoriques exhaustifs [47–51] .

L'effet de la correction excitonique sur la non-parabolicité des bandes

L'énergie de liaison obtenue est faible devant l'énergie des transitions interbandes, soit moins de 1 % ($\sim 3 \text{ meV}$ pour $\sim 810 \text{ meV}$). Toutefois, l'étude de la non-parabolicité des bandes dépend d'une résolution expérimentale de cet ordre de grandeur. À ce sujet, il est intéressant de regarder l'effet de la correction excitonique sur la structure de bande étudiée. À fort champ, l'énergie de liaison diminue avec n comme $\sqrt{\frac{1}{(2n+1)}}$. Ainsi, en absence de correction, l'énergie de liaison de l'exciton a pour effet de réduire la non-parabolicité apparente de la structure de bande du matériau.

Annexe II

Correction polaronique

L'effet magnéto-polaron résonant

Les interactions entre les électrons et les phonons du cristal sont des phénomènes étudiés depuis le milieu du siècle. Nous nous attarderons à l'une de leurs manifestations : l'effet magnéto-polaron résonant. Il s'agit de l'existence d'un couplage entre les niveaux de Landau médié par les phonons LO du cristal. Ce couplage tend à courber ces niveaux $n > 0$ de façon asymptotique à un niveau virtuel d'énergie $\frac{1}{2}\hbar\omega_c + \hbar\omega_{LO}$. On a représenté cette situation à la figure 24.

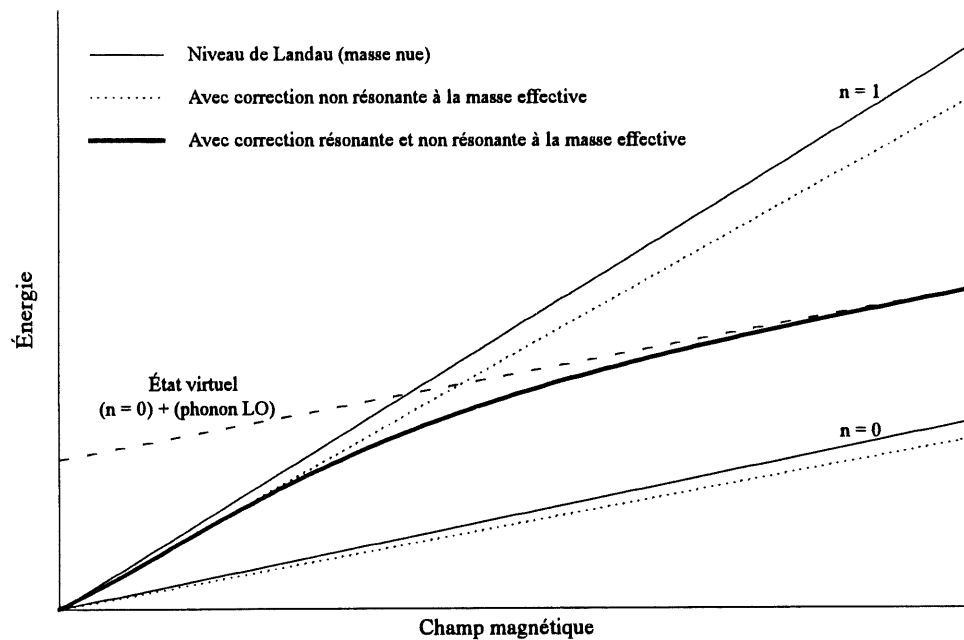


Figure 24 : Schéma représentant l'effet magnéto-polaron résonant sur les deux premiers niveaux de Landau. La correction non résonante augmente la masse effective (traits pointillés). La correction résonante courbe le niveau $n = 1$ (trait gras) vers un niveau virtuel correspondant au niveau $n = 0$ plus un phonon LO (trait brisé).

Annexe II: Correction polaronique

Il est important de tenir compte de cette correction car l'effet magnéto-polaron résonant contribue à augmenter la non-parabolicité de la bande étudiée, comme le montrent les travaux de Pelenc. [6] D'autre part, puisqu'à la fois la non-parabolicité et l'effet magnéto-polaron résonant sont faibles, nous les traiterons indépendamment en cumulant leurs effets.

Le calcul de la correction de l'effet magnéto-polaron résonant

Les travaux de Lindeman *et al.* [52] donnent l'expression suivante pour décrire l'énergie des niveaux de Landau en tenant compte de l'interaction électron-phonon :

$$\tilde{E}[n] = -\alpha\hbar\omega_{LO} + (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c \frac{m_e}{m_o(1 + \frac{\alpha}{6})} + \Delta E^{res}[n], \quad (3.43)$$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\hbar\epsilon_0} \left[\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right] \sqrt{\frac{m_o}{2\hbar\omega_{LO}}}, \quad (3.44)$$

où m_o est la masse effective de électrons de la bande sans interaction avec les phonons dite "masse nue", ω_{LO} est la pulsation des phonons LO du cristal et α est la constante de Frölich. On constate que l'énergie des niveaux de Landau est modifiée de trois façons :

- par un terme constant, $\alpha\hbar\omega_{LO}$, proportionnel à l'énergie des phonons et à la force de leur couplage avec les électrons;
- par un terme linéaire en B , qui augmente la masse effective nue (m_o);
- par un terme résonant, $\Delta E^{res}[n]$, dont la prescription de calcul autocohérent est donnée par Lindeman *et al.*.

Mis à part le terme résonant, on constate que le comportement des niveaux de Landau n'est modifié que par une redéfinition de la masse effective comme suit :

$$m_c^* = \left(1 + \frac{\alpha}{6}\right) m_o. \quad (3.45)$$

Cette masse effective des électrons majorée par le cortège de phonons n'est autre que la masse mesurée expérimentalement. Ainsi, en utilisant m_c^* au lieu de m_o pour les calculs de la structure de bande, on se trouve à tenir compte de l'interaction non résonante des électrons et des phonons. Il ne

reste donc qu'à corriger les niveaux de Landau pour la partie résonante de cette dernière à partir de l'expression suivante :

$$\Delta E_{0 \rightarrow 1}^{res} = (\Delta E^{res} [1] - \Delta E^{res} [0]) = (\tilde{E} [1] - \tilde{E} [0]) - \hbar \omega_c \frac{m_e}{m_c^*}. \quad (3.46)$$

L'analyse que nous venons de faire est valide pour les composés binaires où un seul type de phonon LO est présent. Dans le cas des composés ternaires, comme l'InGaAs, deux types de phonons LO sont présents, à savoir les phonons de type GaAs et de type InAs. L'extension de l'analyse précédente à cette situation se fait simplement par la modification de la constante de Frölich, comme suggéré par Nash *et al.* [53] . C'est cette approche que nous avons retenue pour nos travaux. Le tableau 15 et la figure 25 montrent l'importance de la correction polaronique sur l'énergie des bandes considérées.

	LO-GaAs seulement	LO-InAs seulement	LO-GaAs et LO-InAs
$\hbar \omega_{LO} (meV)$	33.72	28.52	
α (pour $m_o = 0.04$)	0.0495	0.0106	0.0601
Correction non résonante en % de m_c^*	0.83 %	0.18 %	1 %
Correction résonante à l'énergie du niveau $n = 1$ (meV)	0.280	0.114	0.395
en % de l'énergie	1.3 %	0.5 %	2 %
en % des termes non linéaires de l'énergie	18.5 %	7.5 %	26 %

Tableau 15 : Importance de la correction polaronique associée aux phonons LO de type GaAs et InAs dans InGaAs à 8T.

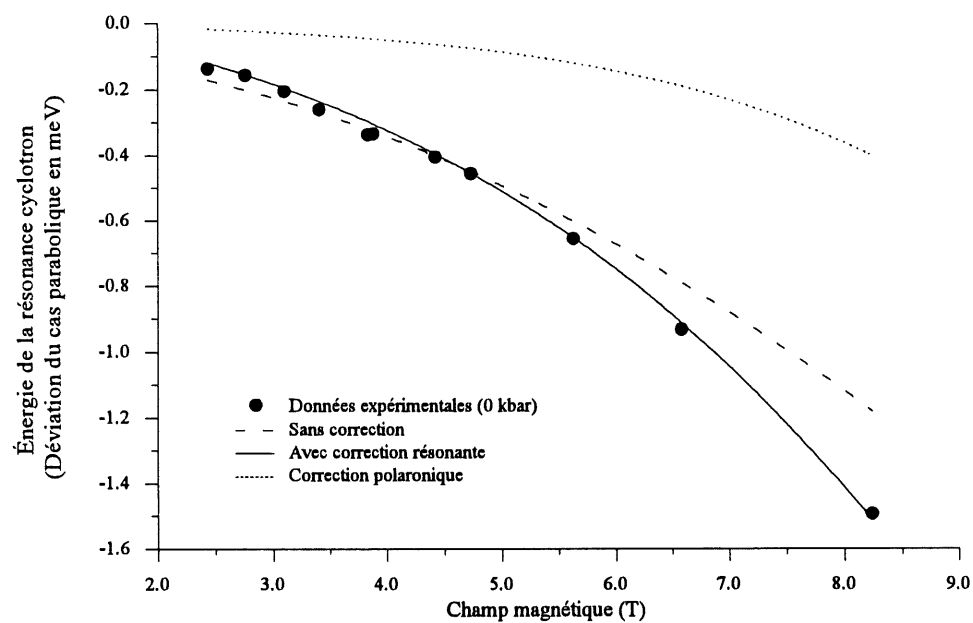


Figure 25 : Exemple de la correction de l'effet magnéto-polaron résonant sur des mesures de résonance cyclotron. On constate que, sans tenir compte de l'effet magnéto-polaron résonant, il est impossible d'obtenir un bon ajustement théorie-expérience (trait brisé). La courbe pointillée représente l'amplitude de l'effet magnéto-polaron résonant.

Bibliographie

- [1] T. P. Pearsall. *IEEE J. Quantum Electron.*, QE-16(7), 1980, p. 709–720.
- [2] T. P. Pearsall. éd. "Electronic Structure of $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ Alloys Lattice-matched to InP", *GaInAsP Alloy Semiconductors*, New York, John Wiley & Sons Ltd., 1982, p. 295–312.
- [3] K. Alavi, R. L. Aggarwal, et S. H. Groves. *Phys. Rev B*, 21, 1980, p. 1311.
- [4] J. Beerens, C. J. Miner, et N. Puetz. *Semicond. Sci. Tech.*, 10, 1995, p. 1233–1236.
- [5] S. Lasserre. *Étude magnéto-optique interbande dans GaInAs/InP*, Mémoire (M. Sc.), Université de Sherbrooke, juin 1990, 77 p.
- [6] D. Pelenc. *Étude magnéto-optique de GaInAs/InP dans l'infrarouge lointain*, Mémoire (M. Sc.), Université de Sherbrooke, juillet 1990, 81 p.
- [7] M. H. Weiler, R. L. Aggarwal, et B. Lax. *Phys. Rev B*, 17(8), 1978, p. 3269–3283.
- [8] G. F. Koster, J. O. Dimmock, R. G. Wheeler, et H. Statz. *Properties of the Thirty-two Point Groups*, Cambridge (Massachusetts), M.I.T Press, 1963.
- [9] C. Hermann et C. Weisbuch. *Phys. Rev B*, 15(2), 1977, p. 823–833.
- [10] L. M. Roth, B. Lax, et S. Zwerdling. *Phys. Rev.*, 114(1), 1959, p. 90–104.
- [11] G. Bastard. *Wave mechanics applied to semiconductors heterostructures*, France, Les éditions de physique, 1988.
- [12] G. Fishman. *Énergie et fonction d'onde des semi-conducteurs*, France, Les éditions de physique, 1988.
- [13] M. H. Weiler. "Magneto-optical Properties of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ Alloys", *Semiconductors and Semimetals*, vol. 16, New York, Academic Press, 1981, p. 119–191.
- [14] E. O. Kane. *J. Phys. Chem. Solids*, 1, 1957, p. 249–261.
- [15] J. M. Luttinger. *Phys. Rev.*, 102(4), 1956, p. 1030–1041.
- [16] C. R. Pidgeon et R. N. Brown. *Phys. Rev.*, 146(2), 1966, p. 575–583.
- [17] R. L. Aggarwal. "Modulated Interband Magneto-optics", *Semiconductors and Semimetals*, vol. 9, New York, Academic Press, 1972, p. 151–187.
- [18] W. Kohn. *Phys. Rev.*, 123(4), 1961, p. 1242–1244.
- [19] P. A. Maksym et T. Chakraborty. *Phys. Rev. Letters*, 65(1), 1990, p. 108–111.
- [20] Y.-F. Chen, M. Dobrowolska, J. K. Furdyna, et S. Rodriguez. *Phys. Rev B*, 32(2), 1985, p. 890–902.
- [21] Y.-F. Chen, M. Dobrowolska, et J. K. Furdyna. *Phys. Rev B*, 31(12), 1985, p. 7989–7994.
- [22] N. R. Ogg. *Proc. Phys. Soc.*, 89, 1966, p. 431–442.

Bibliographie

- [23] M. Dobrowolska. *Semicond. Sci. Tech.*, 5, 1990, p. 159–168.
- [24] E. I. Rashba et V. I. Sherka. *Sov. Phys.-Solid State*, 3(6), 1961, p. 1257–1267.
- [25] E. I. Rashba et V. I. Sheka. *Sov. Phys.-Solid State*, 3(6), 1961, p. 1357–1362.
- [26] B. D. McCombe. *Phys. Rev.*, 181(3), 1969, p. 1206–1217.
- [27] Z. Barticevic, M. Dobrowolska, J. K. Furdyna, L. R. Ram Mohan, and S. Rodriguez. *Phys. Rev B*, 35(14), 1987, p. 7464–7473.
- [28] J. Wlasak. *J. Phys. C*, 18, 1985, p. 4001–4009.
- [29] C. Hermann. *Pompage optique dans l'antimoniure de gallium; Détection optique de la résonance électronique*, Thèse de doctorat, École Polytechnique, Paris, 1976.
- [30] F. Reif. *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. New York, McGraw-Hill Book Company, 1965, 651 p.
- [31] M. Dobers. *Surface Science*, 229(1-3), 1990, p. 126–133.
- [32] A. Beiser. *Concepts of modern physics (second edition)*. New York, McGraw-Hill Book Company, 1973, 405 p.
- [33] G. Martinez. "Optical Properties of Semiconductors under Pressure", *Handbook on Semiconductors*, Vol. 2, Amsterdam, North-Holland Publishing Company, 1980, p. 181–222.
- [34] G. C. La Rocca, Nammee Kim, et S. Rodriguez. *Phys. Rev B*, 38(11), 1988, p. 7595–7601.
- [35] N. Puetz, G. Hillier, et A. J. Springthorpe. *J. Electron. Mat.*, 17, 1988, p. 381.
- [36] I. C. Bassignana, C. J. Miner, et N. Puetz. *J. Appl. Phys.*, 65, 1989, p. 4299.
- [37] S. Huant. *Étude magnétooptique dans l'infrarouge lointain des propriétés électroniques de InSb de type n sous pression hydrostatique* Thèse (doctorat de 3^e cycle), Université scientifique et médicale de Grenoble, Grenoble, avril 1984, 206 p.
- [38] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Mécanique Quantique (Tomes I et II)*, Paris, Hermann, 1977.
- [39] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, et W. T. Vetterling. *Numerical Recipes in C, The Art of Scientific Computing*. Cambridge, Cambridge University Press, 1988.
- [40] S. Adachi. *J. Appl. Phys.*, 53, 1982, p. 8775.
- [41] R. J. Nicholas, C. K. Sarkar, L. C. Brunel, S. Huant, J. C. Portal, M. Razeghi, J. Chevrier, J. Massies, and H. M. Cox. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 18, 1985, p. L427.
- [42] E. H. Perea, E. E. Mendez, et C. G. Fonstad. *Appl. Phys. Lett.*, 36, 1980, p. 978.
- [43] M. Dobers, J. P. Vieren, Y. Guldner, P. Bove, F. Omnes, et M. Razeghi. *Phys. Rev B*, 40, 1989, p. 8075.
- [44] B. Kowalski, P. Olming, B. K. Meyer, D. M. Hofmann, C. Wetzel, V. Harle, F. Scholz, et P. Sobkowicz. *Phys. Rev B*, 49, 1994, p. 14786.
- [45] Landolt-Bornstein. *Numerical data and functional relationships in science and technology*, vol. 22,

Bibliographie

Berlin, Springer-Verlag, 1989.

- [46] A. B. Chen, A. Sher, et W. T. Yost. "Elastic Constants and Related Properties of Semiconductor Compounds and Their Alloys", *Semiconductors and Semimetals*, vol. 37, New York, Academic Press, 1992, p. 1-77.
- [47] R. J. Elliott et R. Loudon. *J. Phys. Chem. Solids*, 1, 1960, p. 196.
- [48] D. Cabib, E. Fabri, et G. Fiorio. *Il Nuovo Cimento*, 10 B(1), 1972, p. 185-199.
- [49] W. Rösner, G. Wunner, H. Herold, et H. Ruder. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, 17, 1984, p. 29-52.
- [50] Y. Yafet, R. W. Keyes, et E. N. Adams. *J. Phys. Chem. Solids*, 1, 1956, p. 137-142.
- [51] Q. H. F. Vrehen. *J. Phys. Chem. Solids*, 29, 1968, p. 129-141.
- [52] G. Lindemann, R. Lassnig, W. Seidenbusch, et E. Gornik. *Phys. Rev. B*, 28(8), 1983, p. 4693-4703.
- [53] K. J. Nash, M. S. Skolnick, et S. J. Bass. *Semicond. Sci. Tech.*, 2, 1987, p. 329.